

ESCUELA DE INGENIERÍA SUPERIOR
UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID



EFFECTOS DE LA CONVECCIÓN NATURAL
EN LA IGNICIÓN TÉRMICA DE GASES
REACTIVOS EN DEPÓSITOS ESFÉRICOS

Autor: Jorge Martínez Notario.

Tutora: Immaculada Iglesias Estradé.

Jueves, 30 de octubre de 2014

Agradecimientos:

Terminar la carrera es un momento muy importante en la vida de cualquier estudiante. Es una meta que nunca es fácil de alcanzar y en la que es tremendamente importante disfrutar por el camino. Desde la infancia, siempre he querido estudiar una carrera de ciencias, en gran parte debido a esa curiosidad por conocer el porqué de las cosas con la que todos nacemos, pero que no todos conservan tras el paso de los años. He de decir que, sin lugar a dudas, la elección que tomé de estudiar ésta carrera en su día, sin duda fue la correcta y, desde luego, no menos acertado fue el hecho de elegir este centro para realizarla. He de decir que en esta decisión influyó enormemente el hecho de que mi hermano también estudiase aquí y al que sin duda le debo muchísimo por todo el apoyo que me ha prestado durante estos años, en el que siempre ha estado dispuesto a ayudarme siempre que podía tener algún problema. Muchas gracias David. Quiero agradecer igualmente a mis padres todo el apoyo y comprensión que me han prestado en el día a día durante el transcurso de la carrera.

Igualmente, quiero agradecer a todos mis amigos los buenos momentos que hemos pasado juntos, y, más si cabe aún, los menos buenos en los que siempre han estado ahí para animarme. No quiero entrar en menciones particulares porque, sin duda, me dejaría a varias personas sin mencionar.

Y muchas gracias, Belén. Desde que nos conocimos, has inundado mi vida de buenos momentos y alegría. Siempre se afrontan mucho mejor los retos que nos depara la vida estando bien acompañado y no hay mejor forma de hacerlo que con alguien como tú.

Finalmente, quiero agradecer en general a todo el equipo docente de la universidad Carlos III, toda su dedicación y esfuerzo en el ejercicio de la enseñanza. Me gustaría hacer especial mención a mi tutora Immaculada, quien ha estado en todo momento disponible y dispuesta a echarme una mano con este proyecto el que, sin lugar a duda, se me hecho mucho más cuesta arriba de no haber contado con ella.

Índice:

1. Introducción y objetivos del proyecto	1
2. Introducción al fenómeno de la ignición espontánea	2
2.1. Influencia de la cinética de la reacción en el proceso de autoignición.....	2
2.2. Análisis del modelo Semenov	4
2.3 Análisis del modelo de Frank-Kamenetskii.....	11
3. Análisis teórico del caso a estudio	18
3.1. Hipótesis y consideraciones previas al desarrollo matemático	20
3.2. Desarrollo del modelo matemático	21
4. Definición del problema en ANSYS Fluent	26
4.1. Adimensionalización del problema en ANSYS-Fluent.....	26
4.2. Definición de la geometría y del mallado.....	27
4.3. Definición del problema en Fluent	30
5. Exposición de resultados y discusión de los mismos	33
5.1. Caso de Frank-Kamenetskii ($Ra=0$)	33
5.2. Estudio de los casos con $Ra > 0$	34
5.3. Comparativa de resultados con estudios previos	43
6. Conclusiones	48
Anexo A	49
Bibliografía y Referencias	51

1. Introducción y objetivos del proyecto:

El fenómeno de la ignición espontánea lleva estudiándose en profundidad desde mediados del siglo XX. En aquella época, Semenov y posteriormente Frank-Kamenetskii, sentaron las bases de la que, a día de hoy, es la teoría de las explosiones de origen térmico. No obstante, a causa de ciertas consideraciones que ambos hicieron en aquella época, principalmente debido a las limitaciones técnicas existentes a nivel computacional, sus modelos han demostrado tener limitaciones que, si bien es cierto, en determinados casos se aproximan mucho a la realidad.

Debido a que hoy día, en pleno siglo XXI, se ha democratizado la informática y a que se dispone de equipos asequibles y herramientas potentes de software, se pueden realizar análisis muchos más exhaustivos de este tipo de problemas, teniendo en cuenta nuevas variables. En el caso que toca, se hará uso de la herramienta de software ANSYS-Fluent, para que, partiendo de las hipótesis de la teoría de Frank-Kamenetskii, se defina un modelo que se asemeje más a la realidad. Concretamente se estudiará el comportamiento y las condiciones críticas previas a la explosión de un gas reactante ocluido en un depósito esférico, cuando entra en juego el fenómeno de la convección no forzada.

En los temas que prosiguen, se hará un repaso sobre las teorías de Semenov y de Frank-Kamenetskii, las cuales se tomarán como punto de partida, desarrollando sus modelos. A partir de aquí, se tomará un modelo que permita el estudio de los efectos que tiene la flotabilidad en la ignición térmica de gases reactivos contenidos en depósitos esféricos. Además, se describirán las ecuaciones que lo gobiernan para, posteriormente, realizar un proyecto en Fluent que permita obtener resultados los cuales serán aquí expuestos. Finalmente, se expondrán las conclusiones sobre la validez del modelo, comparándolo con resultados experimentales previamente realizados y publicados por diversos equipos científicos.

2. Introducción al fenómeno de la ignición espontánea:

Normalmente, para que se produzca la combustión de una sustancia, deben estar presentes estos tres factores: combustible, comburente y energía de activación. No obstante, existe una serie de procesos en los cuáles no está presente el tercer factor. Estos procesos se denominan de combustión espontánea o autoignición.

Este fenómeno, no está necesariamente ligado a la reacción de reactantes ocluidos en una cavidad o reactor. Está ligado a cualquier proceso de combustión para cuyo comienzo, no sea necesaria la existencia de una fuente de calor externa (ninguna llama o fuente de radiación por ejemplo). Se suelen producir por medio de reacciones químicas exotérmicas o biológicas que generen calor internamente.

2.1. Influencia de la cinética de la reacción en el proceso de autoignición.

La teoría de la ignición térmica, está basada en un concepto bastante sencillo. Cuando la velocidad de producción de calor de un sistema es mayor que la velocidad de disipación de calor del mismo, existirán las condiciones para que se produzca una explosión. Cuando ambos ratios son iguales, las condiciones que consideradas críticas se producirán. Como ya se ha comentado y al igual que se estudiará en caso particular analizado en este informe, el detonante para que se produzca una explosión puede provenir de una reacción exotérmica.

Según la teoría de la cinemática de las reacciones de Arrhenius, la velocidad de una reacción química, viene dada por la frecuencia de las colisiones entre moléculas que tiene una dependencia directa con la temperatura de los reactivos. De acuerdo a esta teoría, sólo las moléculas que posean una energía superior a una cierta cantidad E , reaccionarán. Las moléculas obtendrán la energía adicional necesaria de las colisiones inducidas por las condiciones térmicas existentes.

Arrhenius postuló que:

$$k(T) = Ae^{-\frac{E}{RT}}$$

Donde k es la constante cinética de la reacción, A , el factor pre-exponencial o factor de frecuencia (indica la frecuencia a la que se producen las colisiones) y el término exponencial, es el llamado factor de Boltzmann, el cual indica la fracción de colisiones que superan el valor umbral de energía E .

El término de la energía en el factor de Boltzmann, puede considerarse como el tamaño de la barrera sobre la energía potencial de reactivos a sobrepasar para que estos puedan transformarse en productos, como se puede observar en la figura 1. El estado de las especies reactivas al alcanzar esta energía de activación, puede considerarse como un compuesto intermedio que conduce a los productos. A esta energía se la denomina energía de activación y se suele representar mediante E_A .

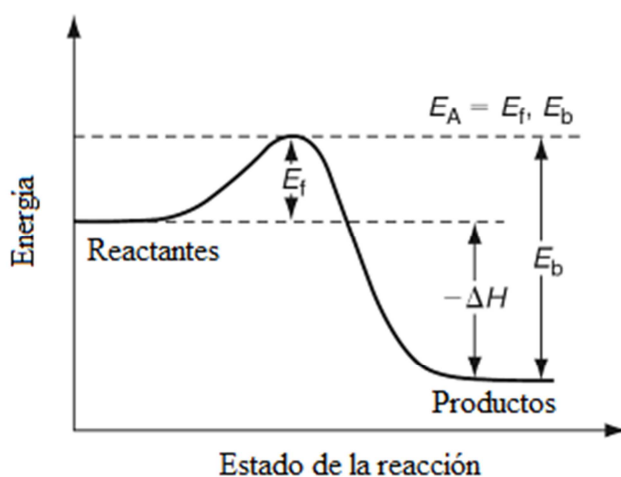


Figura 1: Energía como función del estado de una reacción química

El efecto de la temperatura en la cinética de la reacción, permite deducir que el calor liberado en las reacciones exotérmicas, puede considerarse como el agente catalizador para que se produzca la explosión, debido a que la velocidad de las reacciones aumentan de manera exponencial cuando sube la temperatura.

Los estudios realizados por Semenov y posteriormente por Frank-Kamenetskii sobre las explosiones de origen térmico, han permitido sentar las bases para conocer y poder predecir a nivel cuantitativo en que casos se puede producir este fenómeno. Se procederá a continuación a describir ambos estudios.

2.2. Análisis del modelo Semenov:

Si se asume que el consumo de reactante que la velocidad de una reacción exotérmica es una función exponencial de la temperatura, entonces, según la temperatura del medio suba, el ritmo de generación de calor aumentará exponencialmente a una velocidad superior que la pérdida lineal del mismo por transferencia al exterior. Por tanto, como van't Hoff observó en 1884, hay una temperatura ambiente para cualquier masa de reactante dada por encima de la cual no es posible alcanzar el equilibrio térmico del sistema. Ésta es la “temperatura crítica”. A temperaturas superiores, la producción de calor pasa a ser el proceso dominante y la rápida aceleración de la reacción química culmina con una ignición o una explosión.

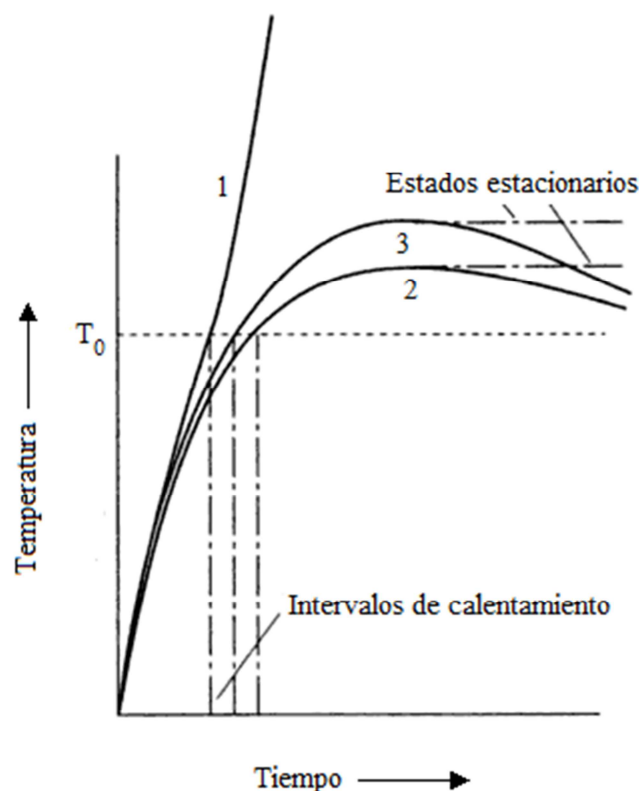


Figura 2: Curvas de temperatura como función del tiempo bajo diferentes condiciones físicas.

Las condiciones críticas, por encima de las cuales un sistema que genere calor entra en ignición o explota, están claramente definidas y el problema estriba en cómo determinarlas. La acumulación de calor, la cual lleva a la explosión del sistema, ocurre

en un intervalo finito de tiempo y, al igual que las condiciones críticas, este periodo es una importante característica de la ignición espontánea. En la figura 2, se puede observar distintas evoluciones de las temperaturas en función del tiempo en un sistema cuyo reactante se consume exotérmicamente, siendo T_0 , la temperatura del medio exterior. Como muestra la curva 1, si la velocidad de generación de calor excede la de pérdida del mismo, se llega a la explosión pasado un tiempo determinado. Si, por el contrario, la pérdida de calor es mayor que la generación, la temperatura llegará a un pico y decaerá según se vaya terminando de consumir el reactante, como muestra la curva 2. Habría una situación, representado por la curva 3, que describe el caso límite para el cual no llegaría a producirse la explosión. Esta sería la condición crítica. Un caso especial sería el de una reacción de orden cero. Este tipo de reacción sería cualquiera cuya velocidad de reacción es independiente de la variación de concentración de los reactantes. En estos casos, una vez el reactante alcanza la temperatura máxima, el ratio de generación permanece constante y la temperatura se estabiliza por encima de la del medio exterior como muestran las líneas punteadas de la figura 3. Esto ocurrirá hasta que todo el reactante se haya consumido.

Semenov, en 1928 hizo la primera representación matemática de la condición crítica de la autoignición. Esta condición dependía de las dimensiones del medio y de las características físicas del reactivo así como de la cinética de su reacción. Obtuvo una estimación del aumento crítico de temperatura del reactante y demostró cómo es posible ignorar el consumo del reactante, para todas aquellas sustancias cuya energía de activación fuera alta.

La teoría asume que para una reacción exotérmica de orden cero, con una velocidad de reacción del tipo Arrhenius, el reactante se calentará uniformemente hasta una temperatura T , la cual es mayor que la temperatura de los alrededores, denominada T_0 . La temperatura final T , sería uniforme en todo el reactante. La interpretación física de este fenómeno es que el fluido reactivo estaría lo suficientemente bien mezclado o, en caso de ser un sólido el reactante, este debería poseer una conductividad térmica relativamente alta en comparación con la del entorno. Tanto en el caso del fluido como en el del sólido, se considerará que el entorno o la frontera serán las paredes del contenedor de los mismos y en ambos casos su temperatura será constante e igual a la exterior. Esto implica la no existencia de un gradiente gradual de temperaturas en el

volumen fluido, sino que este decae repentinamente en la frontera, a una distancia r del centro del volumen correspondiente al radio del mismo, tal y como muestra la figura 3.

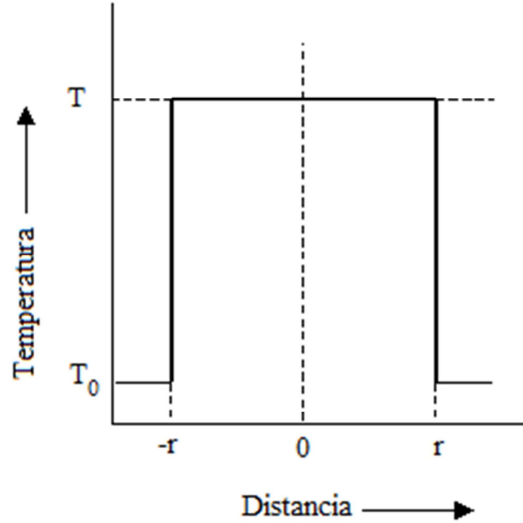


Figura 3: Perfil de temperaturas en un volumen reactivo, según Semenov.

Las ecuaciones que regirán la producción (ecuación 1), y pérdida de calor (ecuación 2) serán las siguientes:

$$\frac{dQ_1}{dt} = q\rho AY_0 e^{-\frac{E_A}{RT}} \quad (1)$$

$$\frac{dQ_2}{dt} = \frac{hS}{V} (T - T_0) \quad (2)$$

donde Q_1 y Q_2 son, respectivamente, el calor producido por la reacción y el cedido al ambiente a través de la frontera por unidad de volumen, q el calor de reacción, expresado en energía generada por unidad de masa de reactante que haya reaccionado, ρ la densidad del reactante, V su volumen, Y_0 la concentración del reactante, el cual se considerará invariante debido a que se considera que la reacción es de orden cero, S la superficie exterior y h el coeficiente de transferencia de calor por convección, el cual Semenov consideró constante pese a ser dependiente de la temperatura. El estado estable se alcanzara cuando la velocidad de generación de calor y la pérdida sean iguales, quedando:

$$q\rho AY_0 e^{-\frac{E_A}{RT}} = \frac{hS}{V}(T - T_0) \quad (3)$$

Este estado se puede alcanzar en reacciones de cualquier orden pero, para reacciones de orden mayor que cero, será transitorio. Para reacciones de orden cero, el estado estable, será el estacionario, puesto que la generación de calor permanecería estable pese al consumo de reactante. Un caso estacionario no es posible obtenerlo experimentalmente, ya que la velocidad de generación decrecen según se consumen los reactantes. El término estado estable puede ser aplicado durante un periodo limitado de tiempo en el cual la temperatura del reactante varía muy lentamente en torno a su máximo antes de empezar a caer.

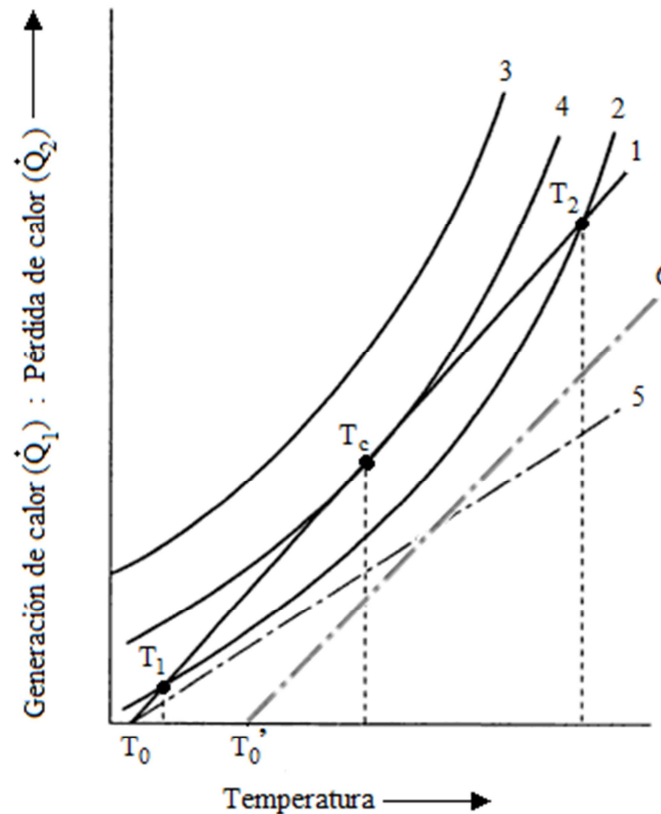


Figura 4: Generación y pérdida de calor en función de la temperatura según Semenov

La figura 4 muestra, de forma esquemática, las curvas de generación y pérdida de calor descritas en las ecuaciones (1) y (2) respectivamente, para diferentes casos arbitrarios. Las curvas 2, 3 y 4, muestran las curvas exponenciales de producción de

calor con distintos grados de concentración o distintos tipos de reactantes con propiedades diferentes, ocluidos en un contenedor en un intervalo dado de temperaturas. La línea 1, muestra la variación de calor cedido al ambiente en función de la temperatura. Las líneas punteadas 5 y 6, se han incluido para observar el efecto que supone aumentar la longitud característica del recipiente contenedor en el caso de la línea 5 y de aumentar la temperatura exterior de T_0 a T_0' en el caso de la 6. Como se puede observar, al aumentar el radio del recipiente, la pendiente de la recta disminuye, esto es debido a que la relación superficie-volumen aumenta en estos casos y por lo tanto, tal y como se muestra en la ecuación (2), el calor cedido por unidad de volumen disminuirá. La línea 6 sufre un desplazamiento en paralelo hacia mayores temperaturas respecto a la 1, esto es debido a que al aumentar la temperatura exterior y por consiguiente la de la superficie interior del contenedor, la cesión de calor por convección disminuye para una misma temperatura del reactante, puesto que la diferencia de temperaturas entre el reactante y la superficie disminuirá. Se van a estudiar los tres posibles casos que pueden sucederse en función de las propiedades del problema. Para todos ellos se tomará como línea de pérdida de calor la línea 1:

- a) Curva de generación 2: En este caso, los reactantes comienzan con una temperatura baja la cual va aumentando según avanza la reacción, hasta alcanzar la temperatura T_1 . En este punto la temperatura deja de crecer debido a que la pérdida de calor es igual a la de generación del mismo, por lo que se habrá alcanzado la temperatura estable. En este momento la única forma de que la temperatura siga creciendo es mediante el aporte externo de energía en cuyo caso la temperatura seguiría aumentando hasta llegar a la temperatura T_2 , que será la temperatura a la que se produce la ignición. Si en un punto intermedio entre T_1 y T_2 , la fuente dejase de aplicar calor, la temperatura volvería a descender hasta el punto de estabilidad, es decir, T_1 .
- b) Curva de generación 3: Como se puede observar a simple vista, la curva de generación es en todo momento mayor que la pérdida, por lo que para cualquier temperatura a la que se encuentre el reactante, éste continuará calentándose, haciendo inevitable la explosión.
- c) Curva de generación 4: Este es el que se considera el caso crítico. En esta situación, la curva de generación y la de pérdida de calor son tangentes, coincidiendo en un mismo punto las temperaturas T_1 y T_2 , cuya temperatura se

designa T_c . El reactante, se calentará hasta alcanzar la temperatura crítica T_c , momento en el cual se producirá un aumento acelerado de la temperatura que llevará a la explosión.

Adicionalmente, analizando las líneas 5 y 6, se puede concluir de que tanto aumentando la longitud característica del recipiente que contiene el reactante como aumentando la temperatura exterior, se facilita que se produzca la ignición.

El método de cálculo que utilizó Semenov para calcular la temperatura crítica, parte de la base de que en ese punto, obviamente, la generación y la pérdida de calor han de ser iguales y de que, al ser ambas curvas tangentes en el punto crítico, las derivadas de estas ecuaciones respecto de la temperatura, también han de serlo quedando:

$$\frac{dQ_1}{dt} = \frac{dQ_2}{dt} \Rightarrow \dot{Q}_1 = \dot{Q}_2 \Rightarrow q\rho AY_0 e^{-\frac{E_A}{RT}} = \frac{hS}{V}(T - T_0) \quad (4)$$

$$\frac{d\dot{Q}_1}{dT} = \frac{d\dot{Q}_2}{dT} \Rightarrow \left(\frac{E_A}{RT^2}\right) q\rho AY_0 e^{-\frac{E_A}{RT}} = \frac{hS}{V} \quad (5)$$

$$\frac{RT_c^2}{E_A} = (T_c - T_0) \quad (6)$$

Para energías de activación lo suficientemente altas, los valores de T_c y T_0 , serán muy próximos y se podrá presumir que

$$\frac{RT_c^2}{E_A} \approx \frac{RT_0^2}{E_A} \quad (7)$$

obteniendo de este modo una buena aproximación al valor de T_c :

$$T_c \cong T_0 + \frac{RT_0^2}{E_A} \quad (8)$$

Esta ecuación es una buena aproximación para la mayoría de casos, en los cuales las energías de activación son muy altas y, por lo tanto, la variación de temperaturas hasta la temperatura crítica T_c , resulta pequeña en comparación con la temperatura exterior.

Para el resto de casos en los cuales no se pueda utilizar esta hipótesis se calculará como sigue a continuación.

$$\frac{RT_c^2}{E_A} = (T_c - T_0) \quad (9)$$

$$T_c^2 - \frac{E_A T_c}{R} + \frac{E_A T_0}{R} = 0 \quad (10)$$

Y utilizando la solución general de la ecuación cuadrática, se llega a:

$$T_c = \frac{E_A}{2R} \pm \frac{E_A}{R} \left(1 - \frac{4RT_0}{E_A} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

Desarrollando el término radical, se llega a estas dos soluciones:

$$T_c = \frac{E_A}{R} - T_0 - \frac{RT_0^2}{E_A} - \frac{R^2 T_0^3}{E_A^2} - \dots \quad (12)$$

$$T_c = T_0 + \frac{RT_0^2}{E_A} + \frac{R^2 T_0^3}{E_A^2} + \dots \quad (13)$$

La solución de la ecuación (12), da temperaturas críticas extremadamente altas y no se corresponde con ninguna situación real. La segunda, proporciona un valor de la temperatura crítica más aproximado al real que el de la ecuación (8). Es interesante observar que si en esta última solución se aplica la hipótesis de la asunción de energías de activación muy altas, se pueden despreciar los términos de mayor orden, quedándose con tan sólo los dos primeros y, de este modo, obteniendo de nuevo la ecuación (8).

La teoría de Semenov, fue el origen del estudio cuantitativo de las explosiones térmicas, del cual se obtuvieron numerosas interpretaciones muy útiles de varios aspectos de la térmica aplicada a este campo. No obstante, hay que recordar que esta teoría presume que la única resistencia térmica de todo el sistema reside en la superficie del reactante, que está en contacto con las paredes del depósito que lo contiene, no considerando que el reactante en sí mismo puede suponer una barrera al flujo de calor.

2.3 Análisis del modelo de Frank-Kamenetskii:

Frank-kamenetskii, atribuyó toda la resistencia térmica entre el reactante y los alrededores, a la conductividad del reactante. Según él entendía, la teoría de las explosiones térmicas, era una ramificación de la teoría de la conducción, con el factor extra de la existencia de diversas fuentes de calor. Consideró la teoría de Semenov como una aproximación de la suya, en lugar de considerar que describía otra realidad física perfectamente válida. Sus suposiciones de que la transferencia de calor utilizaba como único medio la difusión térmica dentro del reactante y entre éste y los alrededores, contrasta con la teoría de Semenov, donde la resistencia está concentrada en la superficie del reactante. La teoría de Frank-Kamenetskii además requiere de la existencia de una distribución de temperaturas dentro del reactante, cuando la de Semenov requiere que la temperatura se uniforme dentro del mismo. Una distribución de temperaturas dentro del reactante, es realista para materiales de baja conductividad.

La teoría de Frank-Kamenetskii, describe esencialmente dos situaciones. Por un lado, el caso de fluidos no agitados y de baja conductividad, que reaccionen exotérmicamente y estén en contenedores de pared muy delgada, con una gran conductividad térmica. Por otro lado estaría el caso de sólidos de baja conductividad térmica, estando o no encerrados en recipientes de pared fina y con alta conductividad.

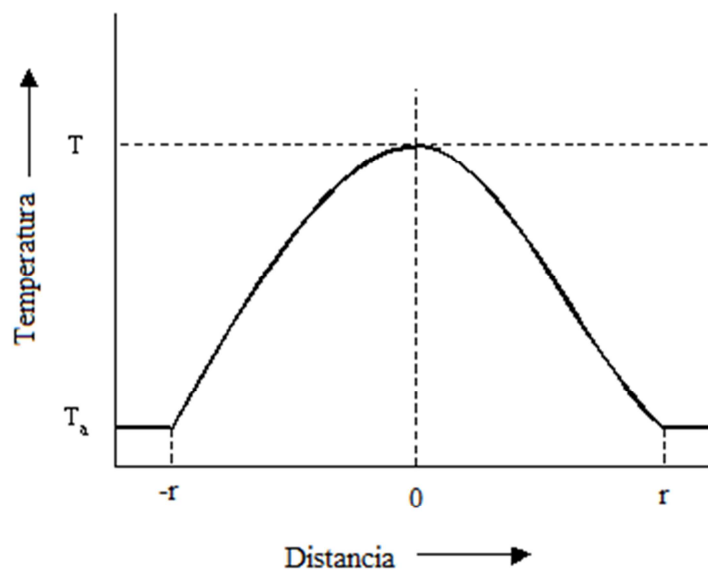


Figura 5: Perfil de temperaturas en un volumen reactivo, según Frank-Kamenetskii

Según la teoría de Frank-Kamenetskii, el calor generado por la reacción se disipará mediante la conductividad térmica del propio reactante. Partiendo de la ley de Fourier y teniendo en cuenta que la generación de calor se producirá mediante una reacción química exotérmica de cinética tipo Arrhenius se tiene que:

$$-\lambda \nabla^2 T + C\rho \frac{dT}{dt} = q\rho A Y_0 e^{-\frac{E_A}{RT}} \quad (15)$$

siendo λ , la conductividad térmica del reactante y C su calor específico. Se consideró la conductividad como una constante independiente de la temperatura ya que el rango de variación de la temperatura en este problema es lo suficientemente pequeño.

Debido a que la ecuación (15) no es resoluble analíticamente, Frank-Kamenetskii hizo uso de una serie de simplificaciones tanto físicas como matemáticas para que esta fuera tratable.

- 1) Al igual que en el modelo de Semenov, se estudió el estado estacionario en una reacción de orden cero. Esta asunción será válida mientras tanto la energía de activación E_A , como el calor de reacción q , sean lo suficientemente grandes ya que, en esta situación, el consumo de reactante hasta llegar a la solución estable, será lo suficientemente bajo. Por este motivo se considerará que la variación de la temperatura con el tiempo será cero, y que tanto la concentración como la densidad del reactante, serán constantes.
- 2) Se consideraron únicamente tres geometrías concretas: dos placas paralelas infinitas, un cilindro infinito y una esfera. Esto simplificó enormemente la complejidad de cálculo que añadía en la ecuación la presencia del operador Laplaciano. Este operador, aplicado a estas tres geometrías, se simplifica pasando a depender de una única variable espacial, x , que será definida como la distancia al centro de las diferentes geometrías, quedando de la siguiente forma:

$$\nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{K}{x} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (16)$$

Siendo K igual a 0, 1 o 2 dependiendo de si se refiere a las placas, el cilindro o la esfera respectivamente.

- 3) Se realizó una aproximación del término exponencial. En el caso de las explosiones de origen térmico, habitualmente interesa la diferencia de temperaturas entre reactantes y alrededores. Frank-Kamenetskii, hizo uso de los resultados de Semenov en los cuales el aumento crítico de temperatura de los reactantes debido a su calentamiento por reacción química exotérmica, era aproximadamente RT_0^2/E_A . Mediante el desarrollo de series de Taylor, centrados en T_0 , del argumento de la exponencial, se tiene que:

$$\frac{E_A}{RT} \cong \frac{E_A}{RT_0} - \frac{1}{1!} \frac{E_A}{RT_0^2} (T - T_0) + \frac{2}{2!} \frac{E_A}{RT_0^3} (T - T_0)^2 - \frac{6}{3!} \frac{E_A}{RT_0^4} (T - T_0)^3 + \dots$$

$$\frac{E_A}{RT} \cong \frac{E_A}{RT_0} \left[1 - \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right) + \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right)^2 - \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right)^3 + \dots \right] \quad (17)$$

Se despreciaron las potencias mayores de 1. Esto puede justificarse siempre y cuando $E_A \gg RT_0$ y $T_0 \gg (T - T_0)$.

Teniendo en cuenta estas hipótesis, la ecuación (15) quedará entonces:

$$-\lambda \nabla^2 T = q \rho_0 A Y_0 e^{\left[-\frac{E_A}{RT_0} \right]} e^{\left[\frac{E_A(T - T_0)}{RT_0} \right]} \quad (18)$$

Ésta, es una ecuación de segundo orden respecto de la distancia, por lo que requerirá dos condiciones de contorno para poder llegar a una solución:

$$-\lambda \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=r} = h(T_{x=r} - T_0) \quad ; \quad \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0} = 0$$

La interpretación física de la segunda condición de contorno, es consecuencia de las geometrías escogidas por Frank-Kamenetskii, ya que al tener un alto grado de simetría todas ellas, la máxima temperatura se alcanzará en el centro de las mismas no habiendo en este punto flujo de calor neto. La de la primera, es que en la frontera, el flujo de calor debido a la conducción por unidad de superficie, debe ser igual al flujo transmitido por convección entre el reactante y la superficie interna del recipiente.

La ecuación (18), junto con las condiciones de contorno definidas para esta, ya es resoluble analíticamente, no obstante, con el fin de simplificar el análisis, él definió los siguientes parámetros adimensionales:

$$\theta = \frac{E_A}{RT_0^2}(T - T_0) \quad ; \quad x' = \frac{x}{r}$$

siendo θ y x' la temperatura y distancia adimensionales respectivamente. La temperatura está adimensionalizada en términos del aumento de temperatura del reactante respecto de la de los alrededores; y toma como referencia, tal cual ya se ha comentado previamente, el aumento de temperaturas estimado por Semenov para llegar al estado crítico. Las distancias se adimensionalizan respecto del radio de las diferentes geometrías. Aplicando estos criterios de adimensionalización a la ecuación (18) y a las condiciones de contorno, se llega a:

$$\nabla^2 \theta = -\delta e^\theta \quad (19)$$

con

$$\left. \frac{d\theta}{dx'} \right|_{x'=1} = Bi\theta \quad ; \quad \left. \frac{d\theta}{dx'} \right|_{x'=0} = 0$$

siendo δ el denominado parámetro de Frank-Kamenetskii, que se define como:

$$\delta = \left(\frac{1}{\lambda} \right) \left(\frac{E_A}{RT_0^2} \right) r^2 q \rho_0 A Y_0 e^{\left[-\frac{E_A}{RT_0} \right]} \quad (21)$$

y Bi el número de Biot,

$$Bi = \frac{hr}{\lambda} \quad (22)$$

Según la teoría de Frank-Kamenetskii, todo el calor se debería ceder mediante la disipación, Esto se produce cuando la temperatura del reactante en su superficie, es igual a la de los alrededores, lo que produciría que no existiese flujo de calor mediante convección. El número de Biot, relaciona la transferencia de calor debida a la conducción con la producida por la convección. Si el número de Biot es pequeño, la

cesión de calor en la superficie del reactante será ineficiente, lo que repercutirá en aumento de temperatura superficial por encima de la de los alrededores, y el perfil de temperaturas del reactante se irá tornando plano. Si el número de Biot tiende a 0, se alcanzará la condición de temperatura uniforme en el reactante descrita por Semenov. Por otra parte, si el número de Biot es grande, el principal mecanismo de transferencia de calor en el reactante será la conducción, y la temperatura de su superficie se acercará a la de los alrededores. Cuando el Biot tiende a infinito, se alcanzará, pues, la condición propuesta por Frank-Kamenetskii, siendo la temperatura del reactante en su superficie la misma que la de los alrededores. En este último caso, las condiciones de contorno, ya adimensionalizadas, quedarán entonces:

$$\theta|_{x'=1} = 0 \quad ; \quad \left. \frac{d\theta}{dx'} \right|_{x'=0} = 0$$

Que fueron las condiciones impuestas por Frank-Kamenetskii.

El parámetro de Frank-Kamenetskii, es un parámetro dependiente de la cinética y la generación de calor de la reacción, de la temperatura de los alrededores, de la conductividad térmica del reactante y de las dimensiones del sistema. Por encima de cierto valor considerado crítico δ_c , la solución se tornará inestable y la autoignición se producirá.

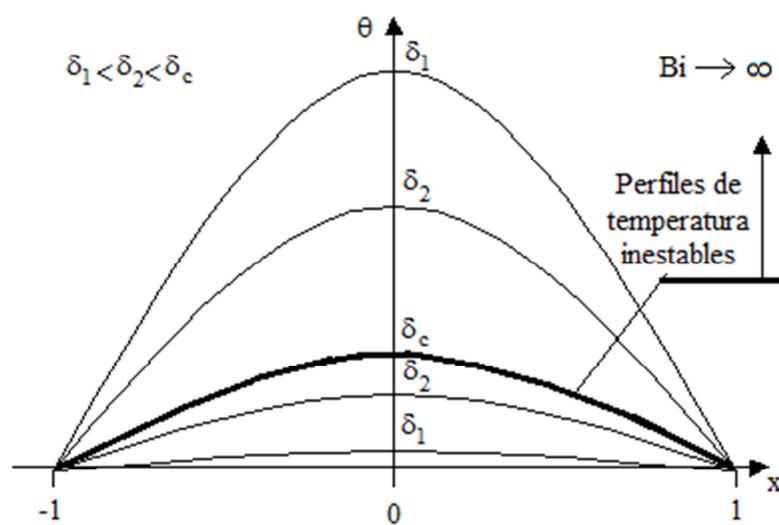


Figura 6: Perfil de temperaturas en función de δ

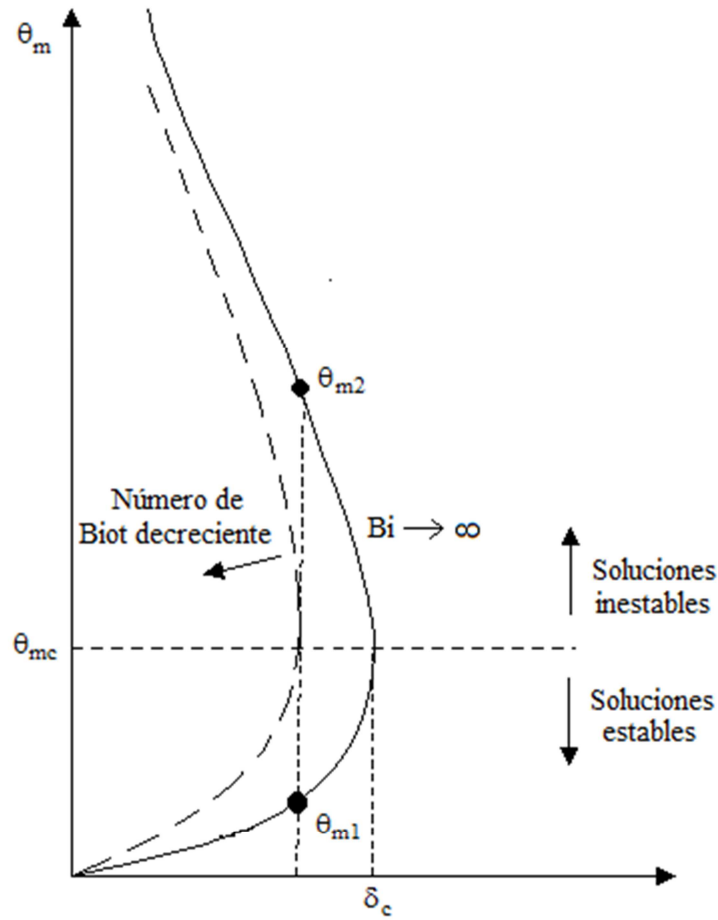


Figura 7: Temperatura máxima del sistema en función de δ

Resolviendo la ecuación (19), se llega a los siguientes resultados representados en las figuras 6 y 7. En la figura 6, se ha representado el perfil de temperaturas en función de δ , para un número de Biot que tiende a infinito, por lo que las condiciones de contorno que se han aplicado, son las de Frank-Kamenetskii.

En la figura 7, se muestra cuál es la forma que toman las distintas soluciones que puede alcanzar la temperatura máxima en función de δ . El mayor valor de la temperatura máxima, se alcanzará para δ_c , siendo todas las soluciones mayores que esta, obtenidas para $\delta < \delta_c$, inestables. Obsérvese que según disminuya el número de Biot, el valor crítico del parámetro de Frank-Kamenetskii será menor, llegando a la conclusión de que a mayores valores del Biot, mayor facilidad existirá para que ocurra el fenómeno de la autoignición. A la vista de los gráficos, se pueden diferenciar tres situaciones diferentes:

- 1) Si $\delta < \delta_c$, el reactante irá aumentando su temperatura hasta alcanzar su primera solución θ_1 , llegada a la cual, a menos que exista una fuente de calor externa, se habrá alcanzado la solución estacionaria (siempre que se ignore el consumo de reactante. En caso de seguir calentando el reactante hasta alcanzar el valor de la solución inestable θ_2 , la autoignición se produciría.
- 2) Si $\delta = \delta_c$, Ésta es la situación crítica. Los gases se calentarán hasta alcanzar la temperatura máxima crítica θ_{mc} , por encima de la cual los reactantes se calentarían rápidamente produciéndose la explosión.
- 3) Si $\delta > \delta_c$, no existirá solución posible, produciéndose inevitablemente la autoignición.

Finalmente, para poder tener una visión cuantitativa del problema, en la siguiente tabla se muestran los distintos valores críticos para las tres geometrías estudiadas, que se obtienen de la aplicación del modelo de Frank-Kamenetskii.

Geometría	δ crítico	θ max crítico
Placas infinitas	0,88	1,19
Cilindro infinito	2,00	1,39
Esfera	3,32	1,60

Tabla 1: Valores críticos de δ y θ_m , para las distintas geometrías

3. Análisis teórico del caso a estudio:

Nomenclatura:

A ,	factor pre-exponencial de la ley de Arrhenius
E_A ,	Energía de activación de la reacción
g ,	aceleración de la gravedad
l ,	radio de la esfera
P ,	presión
Pr ,	número de Prandtl
q ,	calor de reacción
r ,	coordenada radial de la esfera
R ,	constante de la mezcla de gases
Ra ,	número de Rayleigh
T ,	temperatura
u ,	velocidad
z ,	vector unitario en la dirección de la gravedad y con sentido opuesto a esta
α ,	coeficiente de expansión cúbica del reactante
β ,	RT_0/E_A
δ ,	parámetro de Frank-Kamenetskii
θ ,	temperatura adimensional del reactante
κ ,	difusividad térmica del reactante
λ ,	conductividad del reactante
μ ,	viscosidad del reactante
ν ,	viscosidad cinemática del reactante
ρ ,	densidad del reactante
τ ,	tensor de esfuerzos viscosos

Como ya se ha discutido en los apartados anteriores, mientras Semenov afirmaba que la temperatura del reactante era uniforme en todo el volumen fluido y el calor era únicamente disipado mediante el fenómeno de la transferencia de calor por convección en las paredes de su recipiente, Frank-Kamenetskii, apostaba por un modelo puramente conductivo en que existían gradientes de temperatura en el volumen del reactante. No obstante, Frank-Kamenetskii, apuntó que, aumentando lo suficientemente el radio del recipiente, su densidad o la variación máxima de temperatura alcanzada por el reactante, se alcanzaba una condición crítica a partir de la cual la convección empezaba a cobrar importancia. Esta condición crítica se definió en términos del valor del número de Rayleigh, el cual Kamenetskii estimó que debería alcanzar el valor de 10^4 , para que la convección comenzara a tener lugar.

Estudios experimentales posteriores a la publicación de la teoría de Frank-Kamenetskii, como el realizado por Ashmore, Tyler y Wesley en 1967, demostraron que este valor crítico del número de Rayleigh, era mucho más grande que el observado experimentalmente, obteniendo discrepancias lo suficientemente apreciables con el modelo de Kamenetskii, para valores de Rayleigh mayores de 600. Una de las consecuencias derivadas de la aparición del fenómeno de conducción natural, es que el perfil de temperaturas ya no estará centrado en el centro geométrico del recipiente, obteniéndose la máxima temperatura en este punto, sino que la temperatura máxima se irá ubicando por encima del mismo según aumente el Rayleigh. Otra consecuencia será el aumento del δ_c con el número de Rayleigh. Esto se debe a que, según aumenta el Rayleigh, el calor disipado por la convección aumentará, mejorando notablemente el intercambio de calor con el exterior respecto al modelo puramente conductivo.

En los apartados que siguen se estudiará, precisamente, la influencia de la convección en el caso particular de un recipiente esférico, el cual alberga un reactante en estado gaseoso. Para ello, primero se realizará un desarrollo matemático en el que se definirán las ecuaciones que gobiernan el estado del fluido, para posteriormente hacer un análisis cualitativo haciendo uso de la herramienta CAE FLuent.

3.1. Hipótesis y consideraciones previas al desarrollo matemático:

La teoría puramente conductiva descrita por Frank-Kamenetskii, estaba gobernada por la ecuación de difusión. En éste caso, se ha añadido el efecto de la transferencia de calor por convección, por lo que serán necesarias además de la ecuación de la energía, las ecuaciones de continuidad y de cantidad de movimiento de los fluidos con el fin de poder describir el campo de velocidades. Adicionalmente, se partirá de una serie de hipótesis que se describirán a continuación:

- 1) Se estudiará el estado estacionario, por lo que se despreciarán todos los términos transitorios de las ecuaciones de Navier-Stokes.
- 2) Al igual que en los modelos de Semenov y Frank-Kamenetskii, se hará uso de la hipótesis de que la reacción del fluido ocluido en la esfera, será de orden cero. Esto implicará que la concentración de los reactantes como constante durante todo el proceso. Esta consideración se basa en que el consumo de los reactantes hasta alcanzar el punto de máxima temperatura, se puede considerar despreciable.
- 3) La de generación de calor debido a la reacción, será representada como una distribución homogénea de fuentes dentro del fluido. La dependencia del calor generado por la reacción con la temperatura, vendrá dada por la ley de la cinética de las reacciones de Arrhenius.
- 4) El medio reactante es un fluido Newtoniano cuyo flujo es laminar.
- 5) Se considerará que la temperatura de la pared interna del recipiente es constante e igual a la temperatura de los alrededores, T_0 . Igualmente, esta será la temperatura inicial del reactante.
- 6) Se utilizará la aproximación de Boussinesq, en la cual se considera que la densidad será constante excepto en el término de fuerzas másicas de la ecuación de cantidad de movimiento, donde dependerá de la temperatura de la siguiente forma:

$$\rho - \rho_0 = -\alpha\rho_0(T - T_0) \quad (23)$$

Esta aproximación sólo es válida cuando el incremento de la temperatura del sistema es pequeño en comparación con la temperatura inicial del mismo, T_0 .

Las ecuaciones que gobiernan el estado del reactante, serán las de Navier-Stokes, las cuales serán adimensionalizadas a continuación siguiendo los siguientes criterios:

- Distancias: $r^* = \frac{r}{l}$
- Velocidades: $u^* = \frac{u}{v/l}$
- Presiones: $P^* = \frac{P}{\kappa v \rho_0 / l^2}$
- Temperaturas: $\theta = \frac{E_A}{RT_0^2} (T - T_0)$

Obsérvese que la temperatura adimensional, es la misma por la que optó Frank-Kamenetskii en su estudio.

3.2. Desarrollo del modelo matemático:

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (24)$$

Teniendo en cuenta que se está estudiando el caso estacionario y puesto que, por la hipótesis de Boussinesq, se considera la densidad constante en todos los términos excepto en el de fuerzas másicas de la ecuación de cantidad de movimiento, se tiene que:

$$\nabla \cdot u = 0 \rightarrow \nabla^* \cdot u^* = 0 \quad (25)$$

Lo que significa que el fluido se comportará a efectos como si fuese incompresible y, el movimiento del mismo, estará regido por el término de fuerzas másicas de la ecuación de cantidad de movimiento.

Ecuación de cantidad de movimiento:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho f_m \quad (26)$$

Se estudia estado estacionario por lo que,

y aplicando la hipótesis de Boussinesq y dejando la presión referenciada al valor de la misma en el punto más elevado de la esfera, tal que $P=P'+\rho_0gz$, se llega a:

$$\rho u \cdot \nabla u = -\nabla P' + \rho_0gz + \mu \nabla^2 u - \rho_0gz + \rho_0\alpha(T - T_0)gz$$

La cual se procede a adimensionalizar llegando a:

$$\rho_0 \frac{v^2/l^2}{l} u^* \nabla^* u^* = -\frac{\kappa v \rho_0 / l^2}{l} \nabla^* P'^* + \mu \frac{v/l}{l^2} \nabla^{*2} u^* + \rho_0 \alpha \frac{RT_0^2}{E_A} \theta gz$$

Y dividiendo entre:

$$\frac{\rho_0 v \kappa}{l^3}$$

Se tiene que:

$$\frac{v}{\kappa} u^* \nabla^* u^* = -\nabla^* P'^* + \frac{v}{\kappa} \nabla^{*2} u^* + \frac{l^3}{v \kappa} \alpha \frac{RT_0^2}{E_A} \theta gz$$

Teniendo en cuenta la definición del número de Prandtl,

$$Pr = \frac{\mu}{\rho_0 \kappa} = \frac{v}{\kappa}$$

y la del número de Rayleigh,

$$Ra = \frac{l^3}{\nu\kappa} \alpha \frac{RT_0^2}{E_A} g$$

finalmente se llega a:

$$Pr u^* \nabla^* u^* = -\nabla^* P'^* + Pr \nabla^{*2} u^* + Ra \theta z \quad (27)$$

Ecuación de la energía:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{DP}{Dt} + \phi_v - \nabla \cdot \bar{q} + Q_r \quad (28)$$

La ecuación (28), se trata de la ecuación de la energía definida en términos de la entalpía. Se despreciará el término de la presión debido que la energía aportada por las variaciones de esta a causa de la velocidad adquirida por el fluido se considerarán lo suficientemente pequeñas. Teniendo en cuenta que se estudia el estado estacionario, y aplicando la ley de Fourier, considerando que la conductividad térmica se puede expresar como $\lambda = \kappa \rho_0 c_p$, e introduciendo la ecuación de la cinemática de Arrhenius en el término de calor generado por reacción, se tiene:

$$\rho_0 c_p u \cdot \nabla T = \phi_v + \kappa \rho_0 c_p \nabla^2 T + q \rho_0 A Y_0 e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

Realizando una comparativa de órdenes de magnitud entre el término de disipación viscosa y el de disipación térmica tomando como referencia una velocidad característica del sistema arbitraria U , se procede a comprobar si el término de la disipación viscosa es relevante en el caso a estudio:

$$\frac{\phi_v}{\kappa \rho_0 c_p \nabla^2 T} \cong \frac{\mu U^2 / l^2}{(T - T_0) \kappa \rho_0 c_p / l^2} = \frac{\mu U^2}{(T - T_0) \kappa \rho_0 c_p}$$

Definiendo la velocidad del sonido en un fluido y el número de Mach como:

$$c = \sqrt{R\gamma T} \cong \sqrt{R\gamma T_0} ; \quad Ma = \frac{u}{c}$$

y multiplicando y dividiendo por el término $R\gamma T_0$:

$$\frac{\phi_v}{\kappa\rho_0 c_p \nabla^2 T} \cong \frac{\mu Ma^2 R\gamma T_0}{(T - T_0)\kappa\rho_0 c_p} = \frac{Ma^2}{(T - T_0)/T_0} \left(1 - \frac{1}{\gamma}\right) Pr$$

Tomando valores para el número de Prandtl en torno a la unidad (valores típicos de gases), y, puesto que al tratarse de un problema de convección natural en el que se presuponen valores del número de Mach $\ll 1$, se llega a la conclusión de que el término de disipación viscosa será despreciable puesto que:

$$Ma^2 \ll \frac{(T - T_0)}{T_0} \Rightarrow \frac{\phi_v}{\kappa\rho_0 c_p \nabla^2 T} \ll 1$$

A continuación se procede a adimensionalizar la ecuación de la energía. Previamente se realizará una aproximación del término exponencial al igual que hizo Fank-Kamenetskii, pero de una forma alternativa. Para simplificar los cálculos, se define el parámetro adimensional $\beta = RT_0/E_A \ll 1$.

$$e^{-\frac{E_A}{RT}} = e^{-\frac{E_A}{RT_0(\theta\beta+1)}} = e^{-\frac{E_A + E_A\theta\beta - E_A\theta\beta}{RT_0(\theta\beta+1)}} = e^{-\frac{E_A(\theta\beta+1) + E_A\theta\beta}{RT_0(\theta\beta+1)}}$$

sumando y restando en el numerador del exponente, el término $E_A\theta\beta$, queda,

$$e^{-\frac{E_A}{RT}} = e^{-\frac{E_A + E_A\theta\beta - E_A\theta\beta}{RT_0(\theta\beta+1)}} = e^{-\frac{E_A(\theta\beta+1) + E_A\theta\beta}{RT_0(\theta\beta+1)}} = e^{-\frac{E_A}{RT_0}} \cdot e^{\frac{\theta}{\theta\beta+1}} \cong e^{-\frac{E_A}{RT_0}} \cdot e^{\theta} \quad (29)$$

A continuación y teniendo en consideración las aproximaciones realizadas hasta este punto, se procede a adimensionalizar la ecuación de la energía:

$$\rho_0 c_p \frac{\nu}{l^2} \frac{RT_0^2}{E_A} u^* \cdot \nabla^* \theta = \kappa\rho_0 c_p \frac{RT_0^2}{E_A l^2} \nabla^{*2} \theta + q\rho_0 A\gamma_0 e^{-\frac{E_A}{RT_0}} \cdot e^{\theta}$$

Que dividida por el término que multiplica al Laplaciano de la temperatura perteneciente a su vez al término que modela la disipación térmica en la ecuación de la energía queda:

$$Pr u^* \cdot \nabla^* \theta = \nabla^{*2} \theta + \delta \cdot e^{\theta} \quad (30)$$

Siendo δ el ya anteriormente denominado parámetro de Frank-Kamenetskii.

Condiciones de contorno:

Para que el problema sea resoluble, se han de definir las condiciones de contorno. Puesto que las ecuaciones tienen términos de segundo orden respecto de la distancia, se deberán definir dos condiciones de contorno. Por una parte se impondrá que la temperatura del reactante en las paredes del recipiente será igual que la de las paredes del mismo. Adicionalmente, también en las paredes del recipiente, se impondrá la condición de no deslizamiento del fluido. Las condiciones de contorno quedarán entonces de la siguiente manera:

$$\theta|_{r^*=1} = 0 \quad ; \quad u^*|_{r^*=1} = 0$$

Una vez definidas las ecuaciones que gobiernan el comportamiento del fluido y las condiciones de contorno que definen el problema, se procede a definir el problema en el software ANSYS-Fluent.

4. Definición del problema en ANSYS Fluent:

El problema que se trata en este proyecto, una vez planteadas las ecuaciones y condiciones de contorno que gobiernan el comportamiento del mismo, es irresoluble analíticamente. Por este motivo, se ha optado por utilizar para la obtención y el análisis de resultados, la herramienta de software ANSYS-Fluent.

ANSYS-Fluent es un software capaz de llevar a cabo la modelización física del comportamiento de los fluidos. Es un programa basado en el cálculo con volúmenes finitos, lo que permite tratar problemas irresolubles analíticamente mediante la discretización de los mismos. Es un software integral que permite realizar todo el proceso de definición del problema, desde la creación de la geometría y del mallado hasta el análisis de resultados, obtenidos tras definir las condiciones operativas del problema.

4.1. Adimensionalización del problema en ANSYS-Fluent:

Ansyes-Fluent requiere definir todas las características del problema a estudiar con parámetros dimensionales. Sin embargo, en este caso de estudio particular, y para obtener soluciones lo más generales posibles, se ha optado por plantear el problema adimensionalizado como se puede ver en el capítulo anterior. Para que Fluent proporcione resultados coherentes con esta adimensionalización, se ha optado por realizar un artificio gracias al cual los resultados obtenidos serán válidos. Este artificio consiste en obtener el valor de las variables que se deben definir, en función de su correspondencia con los términos de las ecuaciones de cantidad de movimiento y energía adimensionalizadas como se muestra a continuación.

$$\rho_0 u \cdot \nabla u = -\nabla P + \mu \nabla^2 u + \rho f_m$$

$$Pr u^* \nabla^* u^* = -\nabla^* P'^* + Pr \nabla^{*2} u^* + Ra \theta z$$

Analizando la ecuación de cantidad de movimiento, se observa una equivalencia entre el número de Prandtl y la densidad así como como la viscosidad. En el problema a estudiar se ha optado por escoger como valor para el número de Prandtl la unidad

($Pr=1$), ya que, como se ha comentado antes, los gases en general tienen números de Prandtl de ese orden de magnitud. Teniendo esto en cuenta, el valor que se introducirá en el programa tanto en el caso de la densidad, como en el caso de la viscosidad, será precisamente la unidad. Asimismo, existe una correlación entre el producto del Rayleigh y θ , y el término fuente de la ecuación de cantidad de movimiento.

$$\rho_0 c_p u \cdot \nabla T = \lambda \nabla^2 T + q \rho_0 A Y_0 e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

$$Pr u^* \cdot \nabla^* \theta = \nabla^{*2} \theta + \delta \cdot e^\theta$$

En el caso de la ecuación de la energía la correspondencia con la conductividad térmica, es directa, pasando a tener esta un valor adimensionalizado, que se introducirá en Fluent, de una unidad. Existe además una relación entre el Prandtl y el producto del calor específico a presión constante con la densidad. Partiendo de la base que tanto el Prandtl como la densidad tiene un valor numérico, igual a la unidad, no queda más opción de que el calor específico tome igualmente el valor de 1. Finalmente, el valor de δ , al igual que el Rayleigh en la ecuación de cantidad de movimiento, estará íntimamente ligado al término fuente de la ecuación de la energía. Adicionalmente, se ha tomado como radio de la esfera la unidad.

Todas estas propiedades se introducirán en Fluent en el sistema de unidades internacional pero, a la hora de analizar los resultados, se obviarán estas unidades y se interpretarán los mismos como si fuesen adimensionales, ya que tal y como se han realizado estos planteamientos, la solución obtenida será igual que la adimensional con la salvedad de la aparición de dichas unidades.

4.2. Definición de la geometría y del mallado:

Puesto que se asumirá que el movimiento del fluido estará confinado en planos verticales, paralelos a la dirección de la fuerza de la gravedad, y que pasen por el centro de la esfera, se podrá definir el problema como bidimensional y axilsimétrico respecto del ángulo azimutal ϕ . Esto conlleva que la esfera pueda representarse como medio

círculo cuya arista vertical sea el diámetro de la esfera con el consiguiente ahorro en tiempo de computación al reducir notablemente el tamaño y complejidad del mismo.

Para realizar el mallado del semicírculo, se ha optado por que este tenga en la mayor parte de su dominio ($r^* > 0,1$), un mallado en celdas definidas en coordenadas polares formado por cuadriláteros, mientras en el centro de la misma ($r^* < 0,1$), se ha elegido un mallado de cuadriláteros uniformes. La adopción de la este mallado frente a uno más homogéneo, se ha debido a que, la solución del problema para una parte importante de los casos a estudiar, dependerá fuertemente de la distancia al centro de la geometría, por lo que un mallado de este tipo, ayudará a que se alcance la convergencia con mayor facilidad.

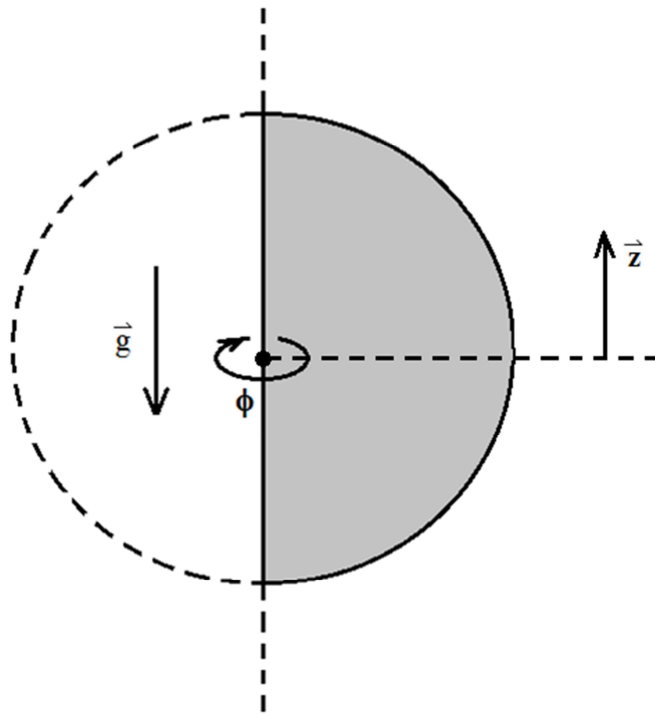


Figura 8: Definición de la geometría según hipótesis de axilsimetría

El mallado inicial, como se ha comprobado al realizar sucesivas simulaciones, no es lo suficientemente preciso o, lo que es lo mismo, en este caso la solución no es independiente del tamaño de las celdas que lo componen. Este mallado ha sido utilizado en las simulaciones como punto de partida para relajar los criterios de convergencia.

Una vez obtenida una primera solución, se procedía a adaptar la malla, aumentando por 4 el número de nodos en casi la totalidad del volumen ($r^* < 0,9$), y por 16 en el resto, que correspondería con los nodos ubicados a menos distancia de la pared del recipiente

(ver figura 10). Esta elección en cuanto a la adaptación no es arbitraria. Se ha utilizado debido a que a números de Rayleigh lo suficientemente grandes, el gradiente de temperatura en algunas zonas cercanas a las paredes será muy alto, por lo que para conseguir una mayor exactitud, se ha optado por aumentar más el mallado en esa región. Se pudo comprobar en las simulaciones, que la solución variaba con errores menores del 1% al hacer sucesivos adaptados de la malla, por lo que concluyó que esta adaptación ya alcanzaba los criterios de exactitud deseables.

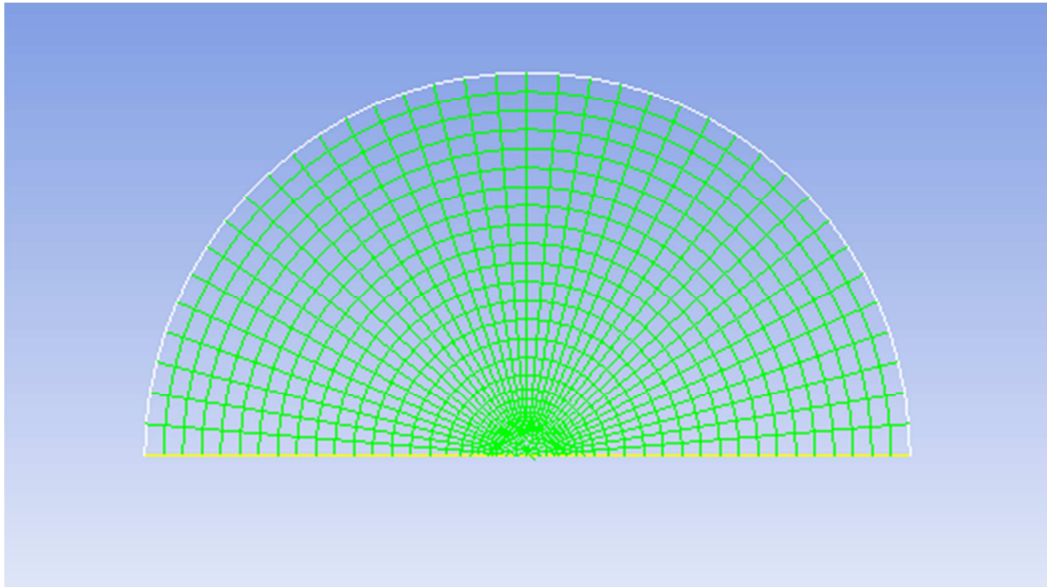


Figura 9: Mallado inicial definido en ANSYS.

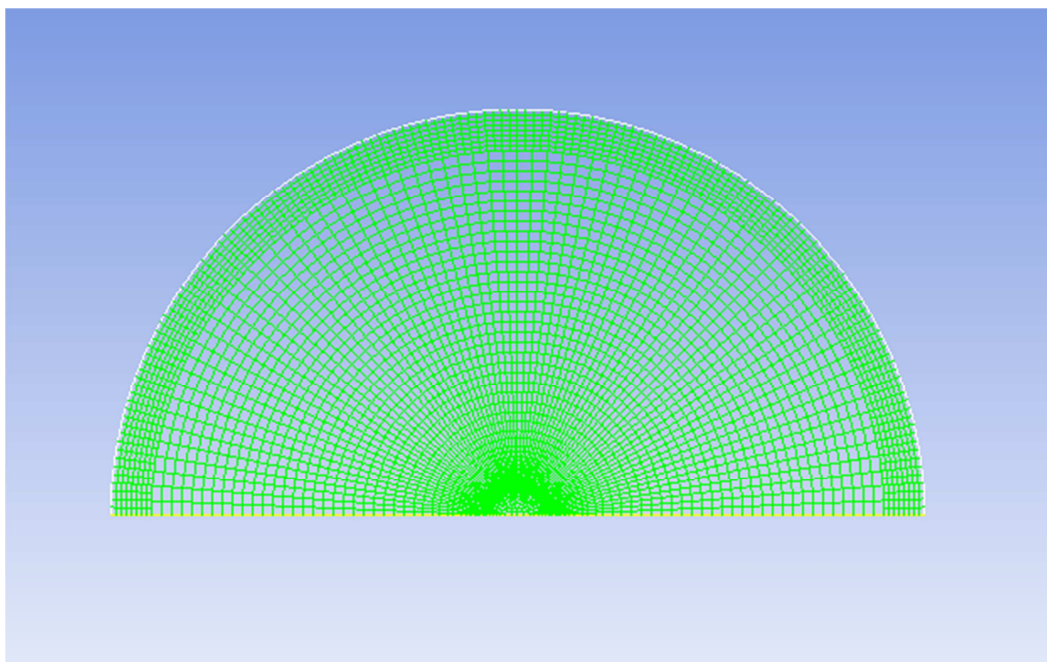


Figura 10: Mallado adaptado.

Las estadísticas tanto del mallado original, como las del adaptado, se exponen a continuación en la tabla 2:

	Malla original	Malla adaptada	Diferencia
Celdas	958	4744	3786
Caras	1962	9660	7698
Nodos	1005	4197	3192

Tabla 2: Datos estadísticos del mallado original y del adaptado.

4.3. Definición del problema en Fluent:

A continuación se procede a implementar el problema en ANSYS-Fluent. Se han de definir desde las características del fluido reactante, hasta las condiciones de contorno del problema, así como los métodos numéricos de resolución usados por el software.

Pese a estudiarse un depósito esférico, se tratará a efectos de cálculo un problema definido en dos dimensiones con condición de axilsimetría, como ya se ha discutido en el apartado anterior. La gravedad no se selecciona, debido a que en el caso a estudio, el efecto de la misma se ha modelado como un término fuente referenciado al Rayleigh y dependiente de la temperatura. Adicionalmente se han seleccionado las características de flujo laminar y del uso de la ecuación de la energía.

Se ha decido usar como método de resolución el “Pressure-Based Solver” frente al “Density-Based Solver”. Históricamente, la aproximación basada en la presión (“Pressure-Based”), fue desarrollada para flujos incompresibles de baja velocidad, en tanto que, la basada en la densidad (“Density-Based”), era principalmente utilizada para flujos compresibles de alta velocidad. En ambos métodos, el campo de velocidades se obtiene de la ecuación de cantidad de movimiento pero, mientras que en la aproximación basada en la densidad, el campo de densidades se obtiene a partir de la ecuación de continuidad para después obtener la presión a partir de la ecuación de estado, la aproximación basada en la presión, obtiene el campo de presiones de una ecuación de corrección de presiones, la cual se obtiene a su vez, manipulando las

ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento. Actualmente, ambos métodos se han desarrollado para poder extenderse a un gran número de situaciones, aunque cada uno obtiene resultados más satisfactorios si se aplican en sus respectivos campos. El caso que se estudia, al aplicar la hipótesis de Boussinesq, es el de un flujo incompresible y de baja velocidad debido a que el origen de la misma será la convección natural no forzada, lo que explica que se haya optado por esta opción. Se ha seleccionado la formulación absoluta de velocidad (“Velocity Formulation” → “Absolute”), en lugar de la opción “Relative”, debido a que la primera es preferible cuando la mayor parte del fluido del dominio no está rotando, mientras la primera funciona bien para el caso opuesto.

Para definir el fluido de trabajo, se han de introducir sus propiedades en Fluent. En este caso se han de definir la conductividad, el calor específico a presión constante, la densidad y la viscosidad del reactante. Tal y como se ha discutido previamente el valor de las propiedades introducidas será para $Pr=1$:

$$\rho = \text{cte} = 1 \text{ kg/m}^3$$

$$c_p = \text{cte} = 1 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$$

$$\lambda = \text{cte} = 1 \text{ W/m} \cdot \text{K}$$

$$\mu = \text{cte} = 1 \text{ kg/m} \cdot \text{K}$$

El problema, va a estar gobernado por los términos fuente de las ecuaciones de cantidad de movimiento y de la energía. Estos términos fuentes dependen no sólo del valor del número de Rayleigh y del de δ , sino que además dependen del valor de la temperatura. Para definir términos fuente que estén relacionados con alguna de las variables del sistema, se ha realizado una udf o “User-Define Function”, la cual, una vez interpretada por Fluent, establece las relaciones entre estos términos y la temperatura. Para ver más detalles sobre el código de la misma, consultar el anexo A.

Se han introducido las condiciones de contorno establecidas en el apartado 3.2. En el apartado “Momentum”, se han seleccionado las condiciones de pared no móvil (“Stationary Wall”), y la de no deslizamiento (“No Slip”). Adicionalmente, en el apartado “Thermal”, se ha fijado una temperatura constante de 0K en la pared.

A la hora de definir los métodos de resolución en “Solution Methods”, se ha optado por la elección de las siguientes opciones:

- En los métodos de interpolación para la discretización, se ha seleccionado “First-Order Upwind” para la primera tanda de iteraciones de cada caso a estudio, ya que posee cierta facilidad para alcanzar la convergencia. Posteriormente, se seleccionaba el método “Second-Order Upwind” para obtener soluciones más precisas. Estos métodos interpolan el valor de las variables ubicadas en el centro de las celdas a las paredes de los volúmenes de control.
- En cuanto a los métodos de interpolación para los gradientes, se ha optado por el método por defecto “Least-Squares Cell-Based”, debido a que combina la precisión de la aproximación “Green-Gauss Node-Based”, con la baja carga computacional utilizada por el “Green-Gauss Cell-Based”.
- Para los métodos de interpolación para la presión, que calculan el valor de la presión en las paredes de las celdas cuando se utiliza el “Pressure-Based Solver”, se ha seleccionado la opción “Standard”. Para valores altos de Rayleigh, se ha utilizado la aproximación “Body-Force-Weighted”, ciertamente se comprueba que la convergencia es más rápida, pero no se han observado discrepancias en los resultados respecto a la opción “Standard”.
- El algoritmo que utiliza Fluent cuando se utiliza el “Pressure-Based Solver”, para obtener la ecuación de la presión a partir de las de continuidad y cantidad de movimiento, se define en el apartado “Pressure-Velocity Coupling”. En este apartado se ha seleccionado la opción por defecto “SIMPLE” debido a que es la más robusta.

Una vez ya definidas todas las variables de Fluent se ha procedido a la obtención de datos para su posterior análisis y discusión de los mismos.

5. Exposición de resultados y discusión de los mismos:

A continuación se exponen los resultados obtenidos de las diversas simulaciones realizadas en Fluent. Se han estudiado el caso para diversos valores del número Rayleigh que oscilan entre 0 y 100000. Se ha obtenido mediante iteración, el valor crítico del parámetro de Frank-Kamenetskii, δ_c , para cada caso, así como el perfil de temperaturas y las líneas de corriente generados en el reactante.

5.1. Caso de Frank-Kamenetskii ($Ra=0$):

El caso particular de $Ra = 0$, en el que el término de fuerzas másicas no existiría, e precisamente el mismo que él discutió. Éste sería el caso puramente conductivo, en el cual no se producirá convección natural y el fluido permanecerá estático, por lo que no tiene sentido hablar de líneas de corriente.

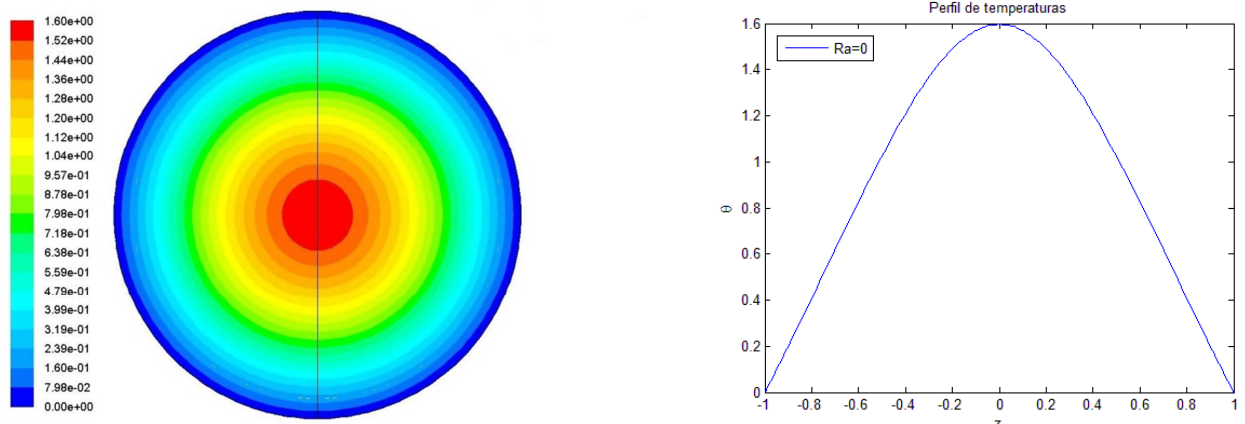


Figura 11: Isotermas del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico de $Ra=0$ y $\delta_c=3,325$

Se puede observar una distribución concéntrica de las isotermas, y que la temperatura máxima, está ubicada en el centro de la esfera. La temperatura máxima adimensional alcanzada toma el valor de $\theta_m = 1,6$, y el valor crítico del parámetro de Frank-Kamenetskii, que toma el valor crítico de $\delta_c = 3,325$, coinciden con los calculados numéricamente por él como se observa en la tabla 1.

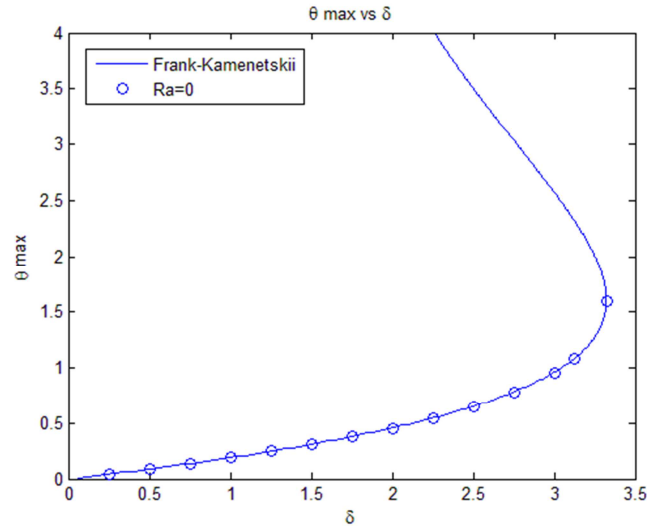


Figura 12: Temperatura máxima del sistema en función de δ para $Ra = 0$

En la figura 12, se observa que la variación de la temperatura máxima en función de δ , es prácticamente igual que la descrita por Frank-Kamenetskii. La línea continua es la solución hallada por Frank-Kamenetskii mientras que los puntos son los datos obtenidos en la simulación de Fluent. Ciertamente, de las similitudes entre las soluciones, se puede concluir que el modelo planteado describe adecuadamente este caso particular.

5.2. Estudio de los casos con $Ra > 0$:

Al aumentar el número de Rayleigh, la convección irá haciendo acto de presencia, provocando que los perfiles de temperatura se distorsionen respecto los del caso de Frank-Kamenetskii. Debido a la presencia de la gravedad, las zonas de un fluido más calientes, tienden a subir a causa de la disminución de densidad que experimenta, por lo que el punto de máxima temperatura, se desplazará respecto del centro de la esfera, en sentido contrario al de la gravedad. Otra consecuencia derivada de este fenómeno, es que el fluido adquirirá movimiento siguiendo una serie de líneas de corriente. Esto se produce debido a que el fluido caliente que sube, se enfriará más rápido según se aproxime a las paredes del depósito, lo que crea un ciclo de movimiento cerrado. A continuación se exponen una serie de figuras en las que se representará la forma de las líneas de corrientes e isothermas del reactante, así como el perfil de temperaturas existente en el eje de simetría:

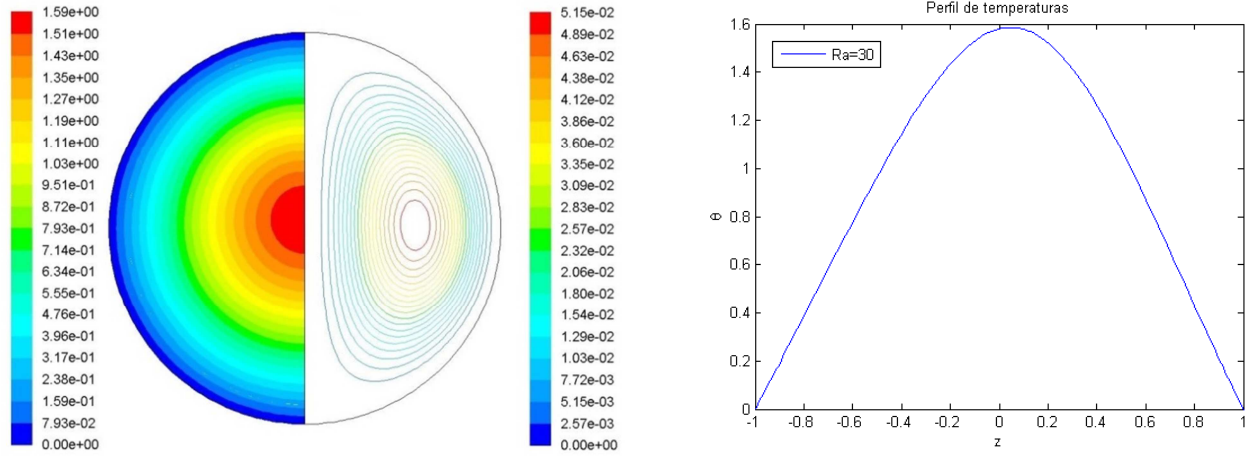


Figura 12.1: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=30$ y $\delta_c=3,33$

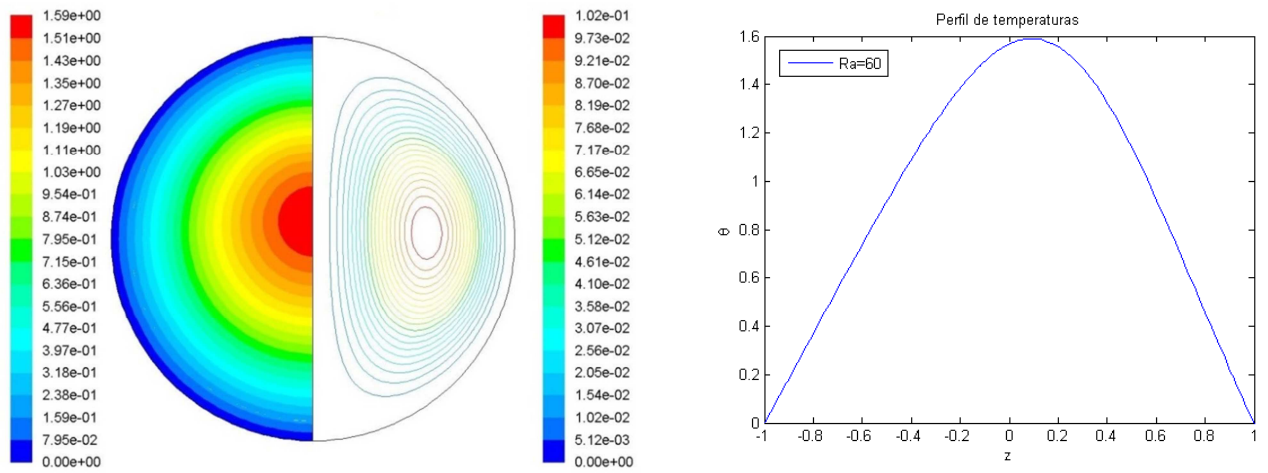


Figura 12.2: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=60$ y $\delta_c=3,34$

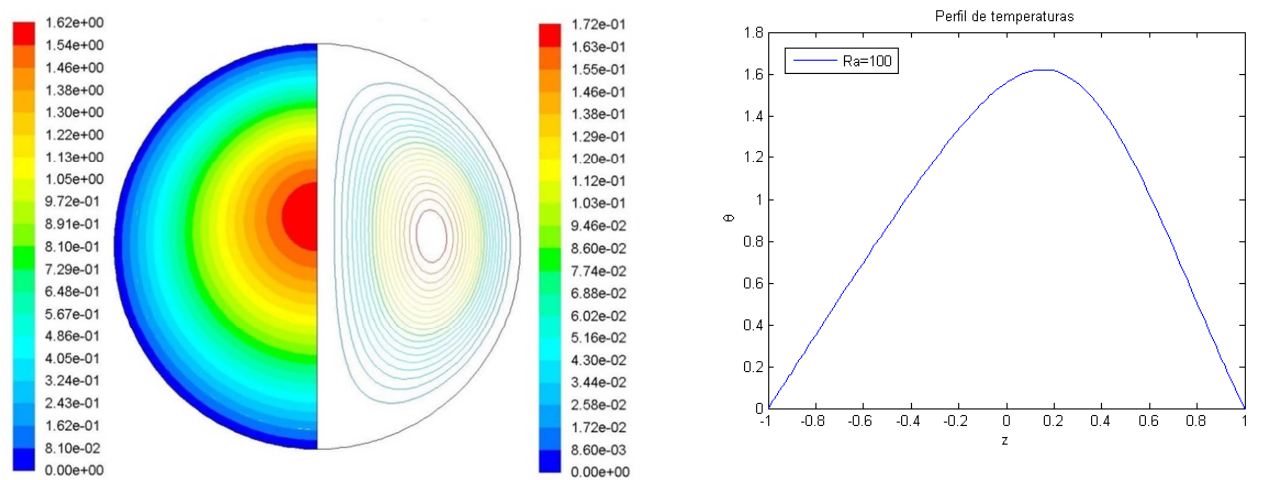


Figura 12.3: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=100$ y $\delta_c=3,37$

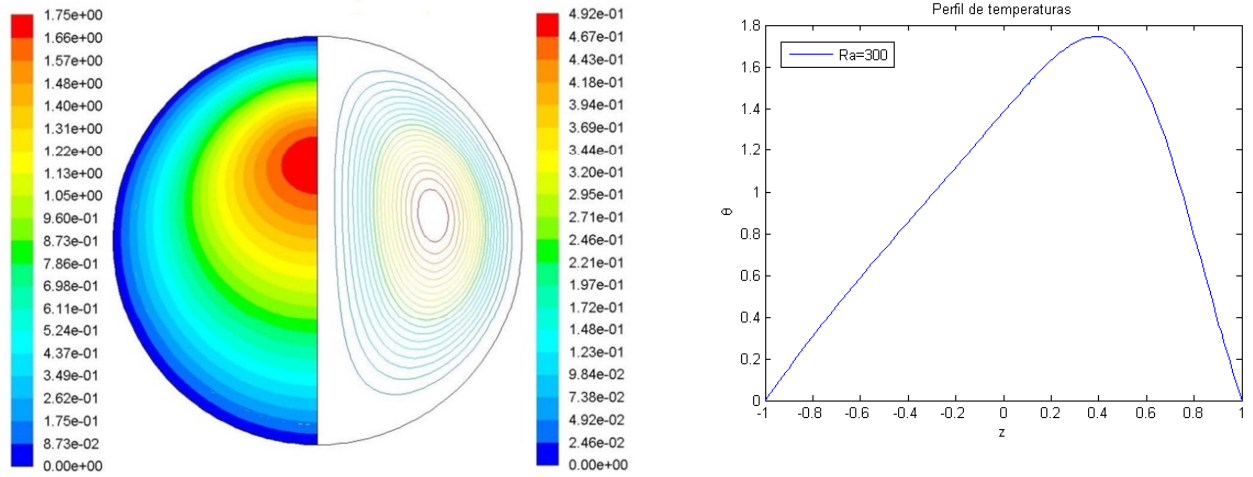


Figura 12.4: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=300$ y $\delta_c=3,62$

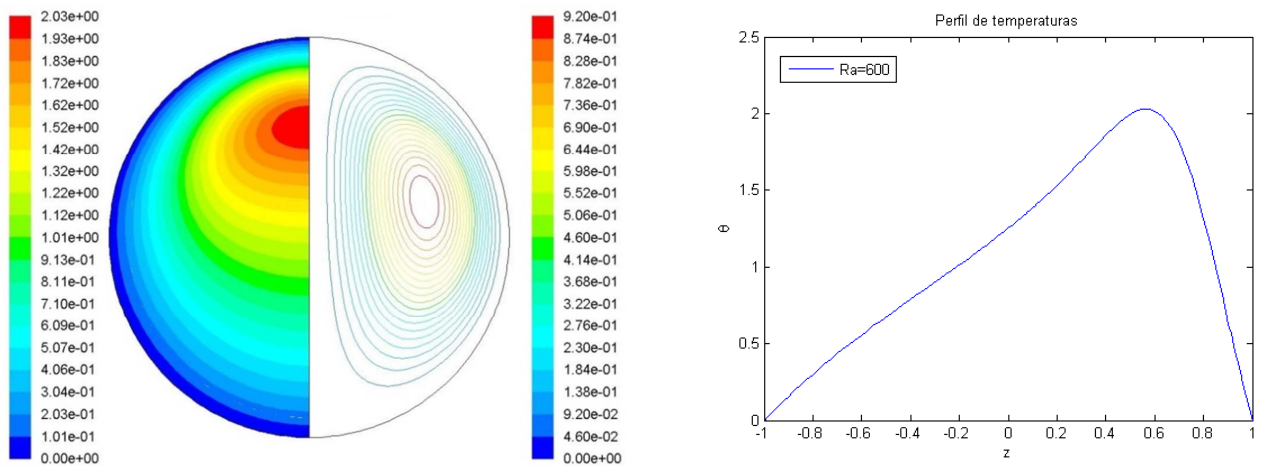


Figura 12.5: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=600$ y $\delta_c=4,10$

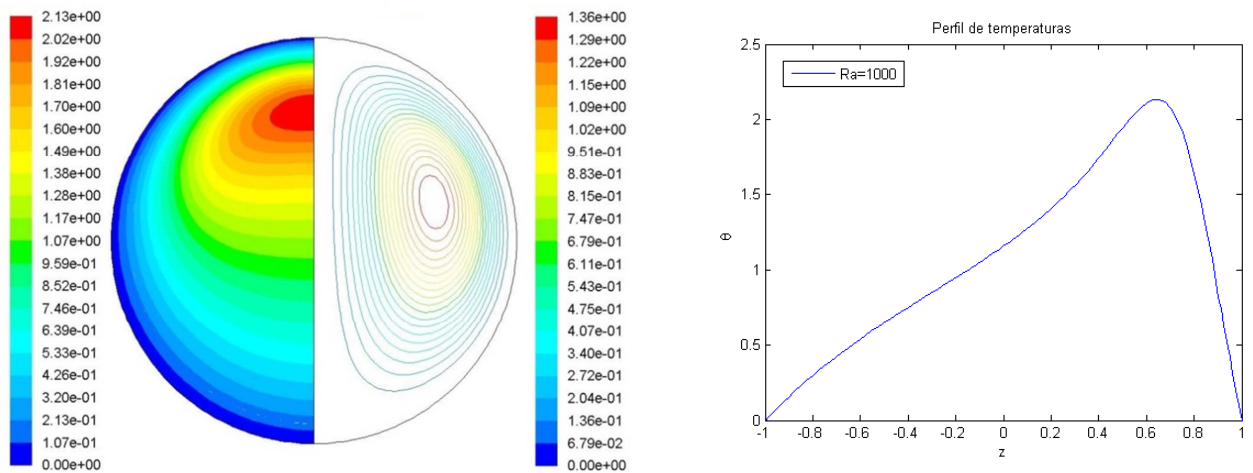


Figura 12.6: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=1000$ y $\delta_c=4,57$

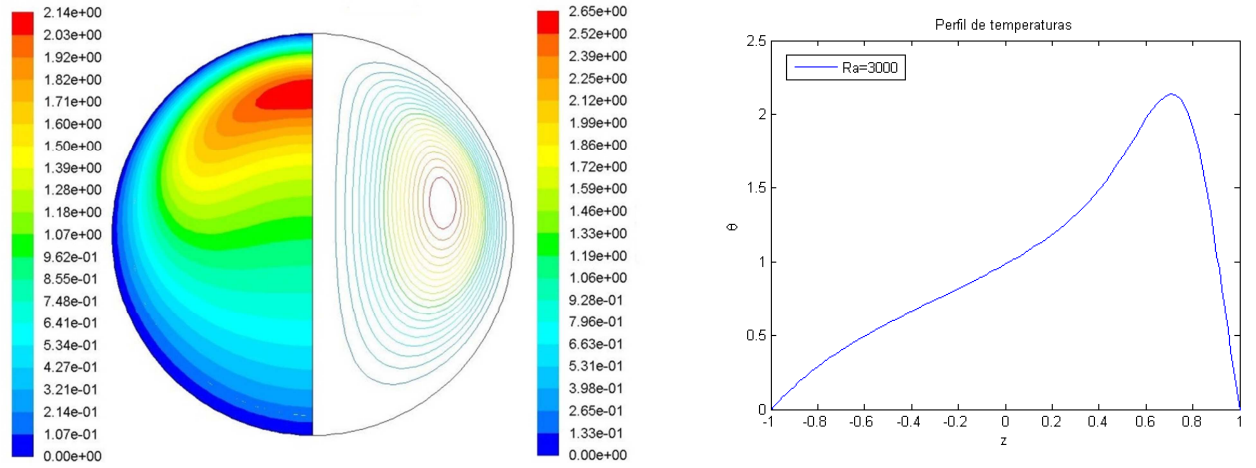


Figura 12.7: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=3000$ y $\delta_c=5,73$

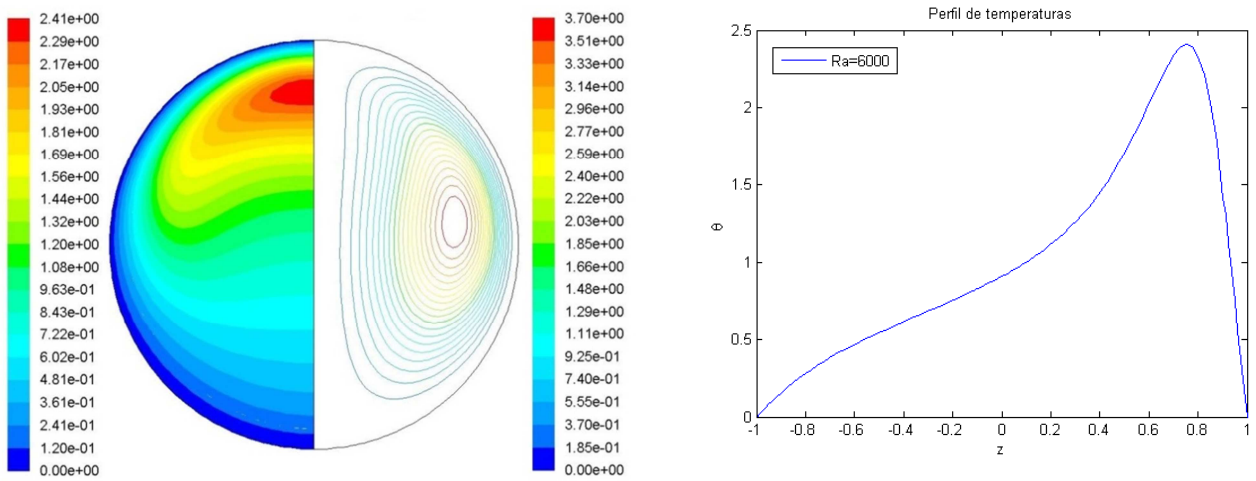


Figura 12.8: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=6000$ y $\delta_c=6,62$

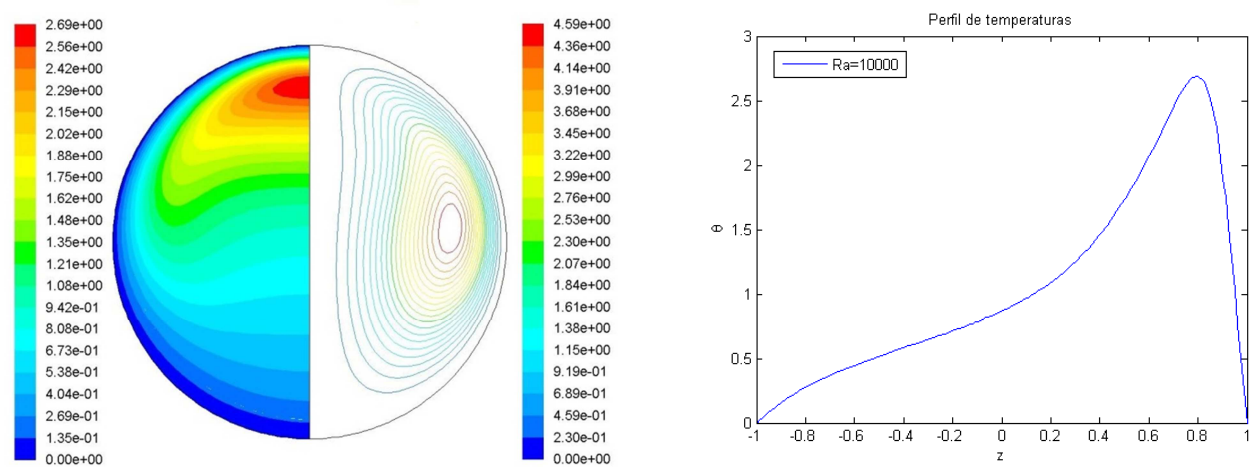


Figura 12.9: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=10000$ y $\delta_c=7,41$

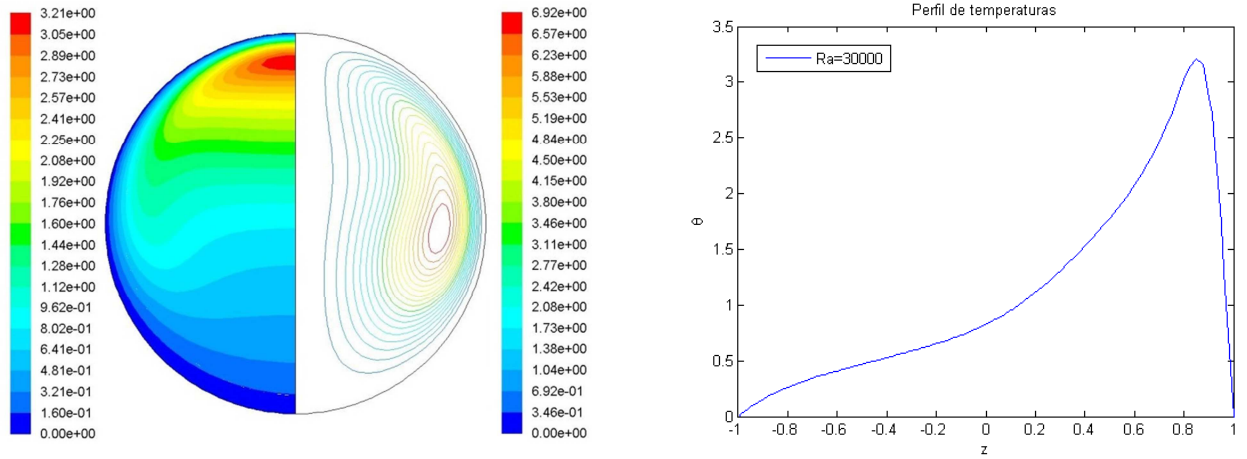


Figura 12.10: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=30000$ y $\delta_c=9,55$

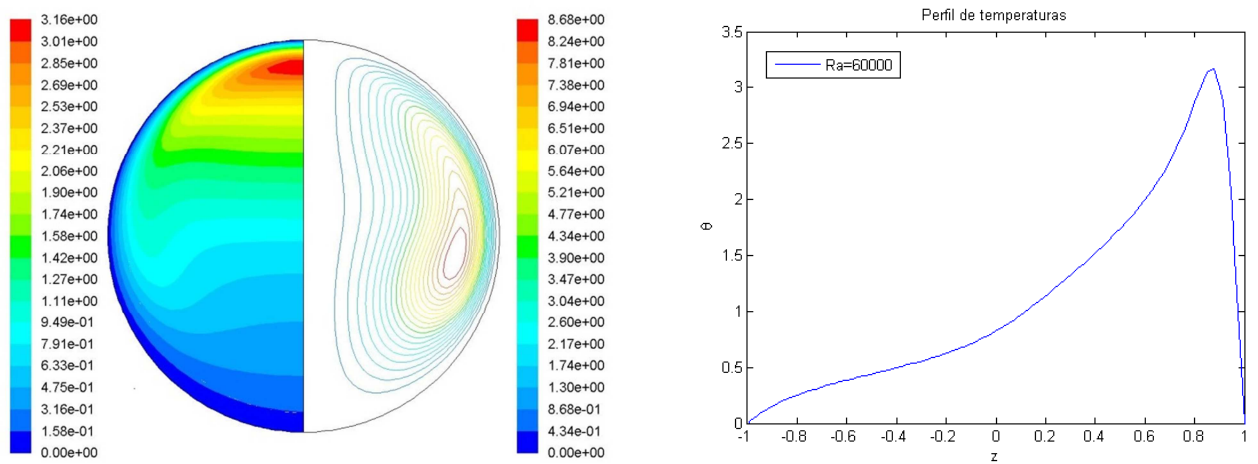


Figura 12.11: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=60000$ y $\delta_c=11,21$

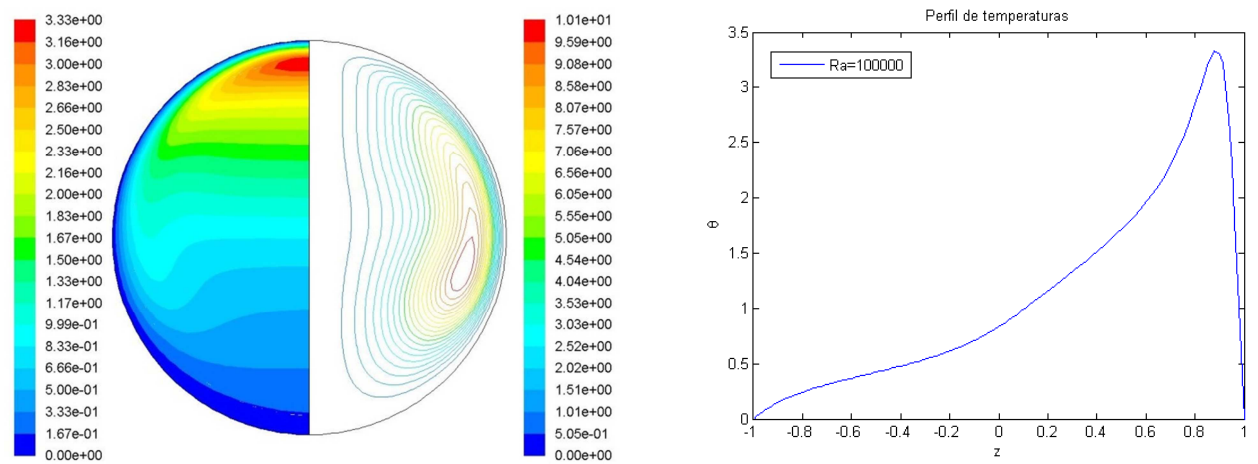


Figura 12.12: Isotermas y líneas de corriente del reactante y perfil de temperaturas en el eje de simetría para el caso crítico con $Ra=100000$ y $\delta_c=12,64$

Ra	δ crítico	θ max crítico	Altura θ max
0	3,325	1,60	0
30	3,33	1,59	0,05
60	3,34	1,59	0,09
100	3,36	1,62	0,15
300	3,62	1,75	0,38
600	4,10	2,03	0,55
1000	4,57	2,13	0,65
3000	5,73	2,14	0,70
6000	6,62	2,41	0,75
10000	7,41	2,69	0,80
30000	9,55	3,21	0,85
60000	11,21	3,16	0,88
100000	12,64	3,33	0,88

Tabla 3: Variación de δ_c , θ_m , y de la posición de ésta última sobre el centro de la esfera.

En la figuras 12.1-12.12, se han representado la disposición de las isothermas y de las líneas de corriente dentro del volumen fluido, así como el perfil de temperaturas que existe en eje de simetría en condiciones críticas ($\delta = \delta_c$) y para distintos valores de Rayleigh. En la tabla 3, se muestran los valores más significativos que se han recopilado de estas simulaciones y, en la figura 13, se han representado éstos gráficamente en función del logaritmo decimal del Raileigh.

A la vista de los resultados, y como queda claramente reflejado en la figura 13b, se puede concluir que existe una relación directa entre el número de Raileigh, y el valor que se obtiene de δ_c . Esto se debe a que si, además de la conducción, se produce la convección, la capacidad del sistema para disipar calor aumentará y, en consecuencia, mayores valores de δ , que están ligados a mayores cantidades de calor generado por la reacción, podrán alcanzarse sin producirse la explosión. Una consecuencia directa de esto, es que, la temperatura máxima que podrá alcanzar el sistema sin llegar al punto de autoignición también aumentará. En la figura 14, se puede observar cómo varía precisamente la temperatura máxima alcanzada en el sistema con δ , para distintos valores de Rayleigh.

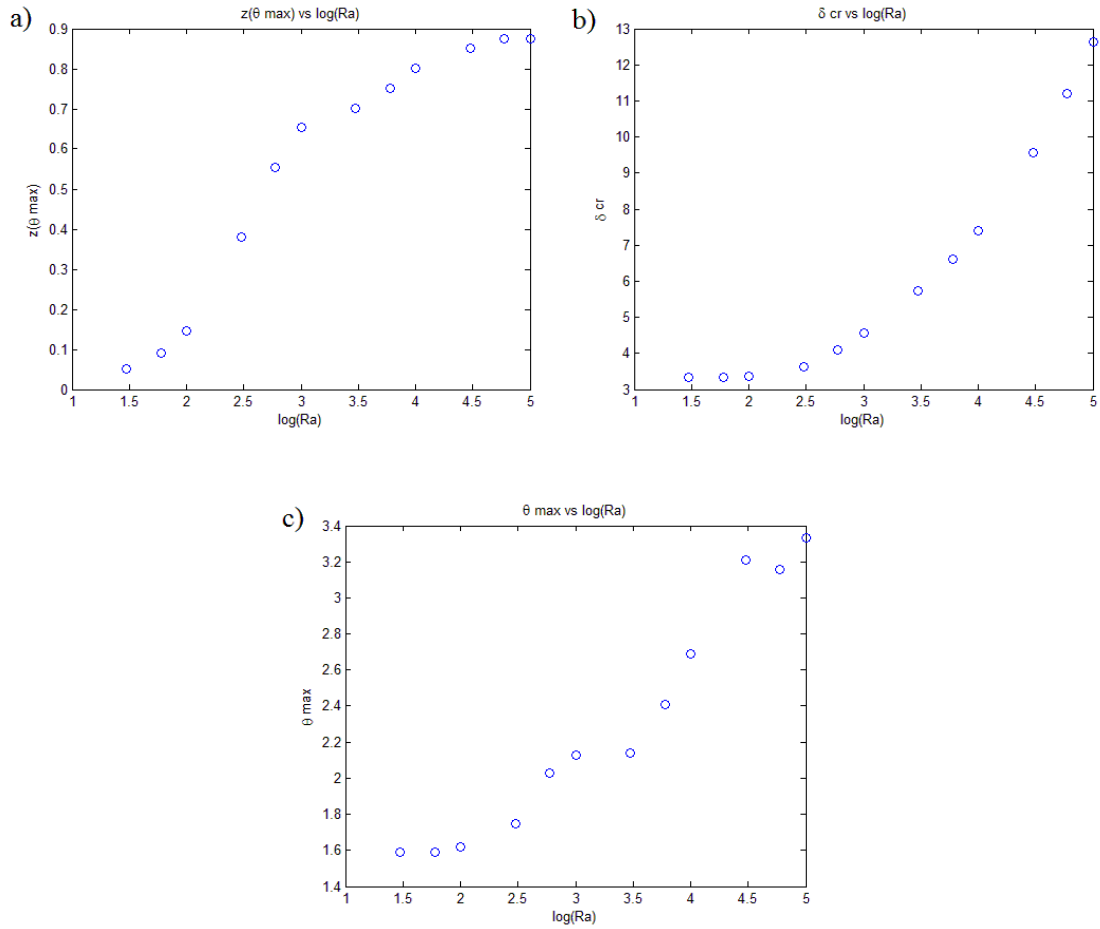


Figura 13: Variación de la posición en el eje de simetría del punto de temperatura máxima (a), de δ_c (b), y de θ_m (c), con el Rayleigh

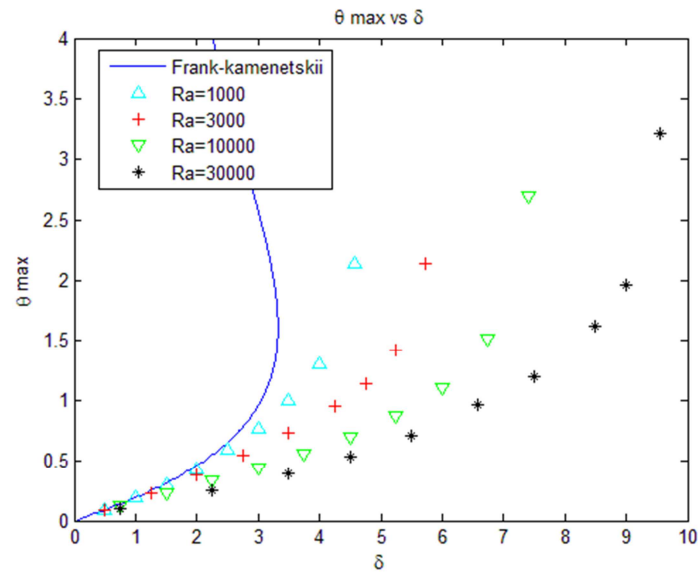


Figura 14: Variación de la temperatura máxima alcanzada en el sistema en función de δ para distintos valores de Rayleigh.

Se puede observar en la figura 14 que, efectivamente, tanto δ como la temperatura máxima que puede llegar a alcanzar el reactante aumenta con el número de Rayleigh. La forma descrita por las soluciones estables, se asemeja a la calculada por el Frank-Kamenetskii, pero desplazada a mayores valores de δ y de variación de la temperatura. Obsérvese además que, para un mismo valor de δ , la temperatura máxima alcanzada será menor, según aumente el Rayleigh. Esto se debe a la ya comentada mejora en la cesión de calor debida a la contribución en esta de la convección natural.

Otro cambio respecto al modelo puramente conductivo, es que se producirá una variación en la distribución de temperaturas ya que, al generarse la convección natural, el fluido más caliente se desplazará en la dirección positiva del eje de simetría y el perfil de temperaturas dejará de ser simétrico. Éste fenómeno, queda debidamente represando tanto en la figura 13a, como en los perfiles de temperaturas de las figuras 12.1-12.12, donde se aprecia que, según aumenta el Rayleigh, el perfil de temperaturas pasa de ser parabólico a ir tomando la forma de pico desplazado del centro de la esfera. En la figura 15, se observa la variación del perfil de temperaturas en función de δ .

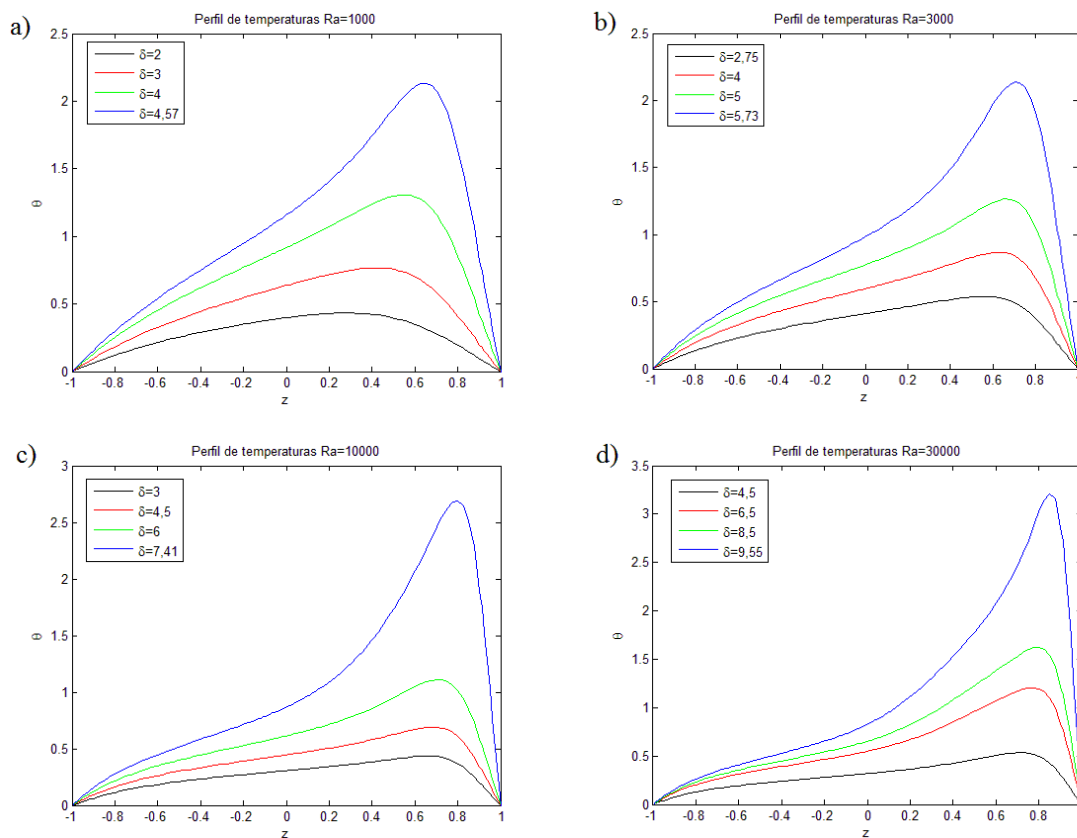


Figura 15: Perfil de temperaturas para distintos valores de δ en sistemas con a) $Ra=1000$, b) $R=3000$, c) $Ra=10000$ y d) $Ra=30000$.

Se ha incluido adicionalmente la figura 16, donde queda representado cómo varía la posición del punto de máxima temperatura en función de δ , para distintos Rayleigh. Al aumentar el valor del Ra , aumenta la influencia de la convección, haciendo que el desplazamiento del punto de temperatura máxima sea mayor para un mismo valor de δ .

El fluido reactivo, se desplazará formando círculos como se puede apreciar al observar las líneas de corriente en las figuras 12.1-12.12. El reactante subirá por la zona central de la esfera paralelamente al eje de simetría calentándose hasta alcanzar la zona cercana a la superficie del depósito, donde comenzará una bajada siguiendo a esta, en la que irá perdiendo calor paulatinamente hasta cerrar el ciclo. Obsérvese que según aumenta el Rayleigh el valor adimensional de la función de corriente también aumenta acercándose las líneas de corriente además a la superficie del depósito. Esto no sólo implica que el fluido se moverá a más velocidad, sino que además se producirá un aumento mucho mayor de la misma, en las proximidades de las paredes del depósito que en las cercanías del eje de simetría, lo que deriva en un incremento del calor disipado por convección.

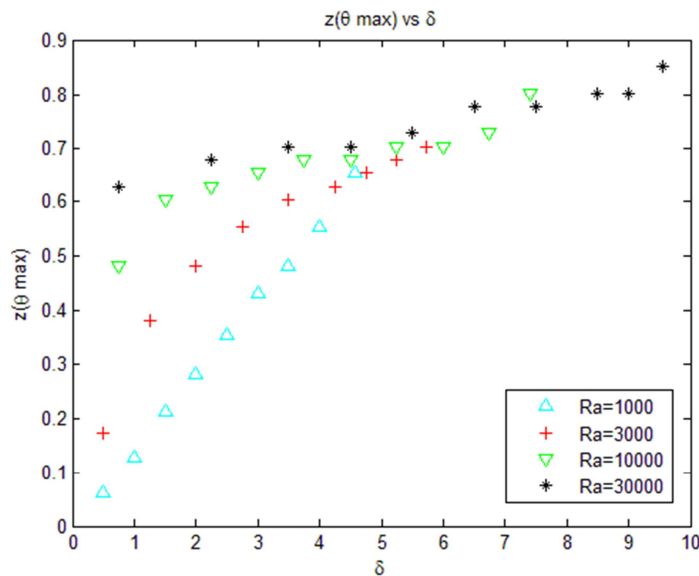


Figura 16: Ubicación de la temperatura máxima en función de δ para distintos valores de Ra

Frank-Kamenetskii consideró que el efecto de la convección natural, no sería apreciable hasta alcanzar valores de $Ra > 10000$, siendo su modelo correcto para todos

los valores de Rayleigh inferiores a este. A la luz los datos obtenidos de las simulaciones, a partir de $Ra > 600$, los efectos de la convección natural, se empiezan a hacer apreciables. A partir de este valor, las discrepancias con el modelo de Frank-Kamenetskii superan el 20% tanto para la temperatura máxima alcanzada como para el valor de δ_c , siendo los efectos de la convección ya muy notables para valores de Rayleigh cercanos a 10000, al contrario de lo que afirmaba Kamenetskii.

5.3. Comparativa de resultados con estudios previos:

A continuación se va a hacer una serie de comparativas de los resultados obtenidos en este estudio, con los realizados en estudio previos, a fin de comprobar la validez de las hipótesis tomadas en el desarrollo del modelo aquí a estudio.

Ashmore, Tyler y Wesley realizaron en 1967, un estudio titulado “*Experimental Investigations of Conductive and Convective Heat Transfer in Relation to Thermal Ignitions*”, en el cual realizaron una serie de experimentos con gases reactivos en un depósito esférico, con el fin de estudiar la dependencia del Rayleigh en la distribución de temperaturas del reactante. Se utilizaron recipientes de distintas capacidades (280 cm^3 , 660 cm^3 y 1100 cm^3), a los que les introdujo en un baño de sales con el fin de mantener a una temperatura constante las paredes del recipiente.

Demostraron que, al aumentar el Ra , la distribución de temperaturas perdía su simetría, alcanzando su máximo a una altura superior al punto medio de la geometría. Adicionalmente se observó una disminución de la temperatura en el centro del depósito respecto a la calculada mediante la teoría de Frank-Kamenetskii. En la figura 17, se representa la relación entre la temperatura en el centro del depósito, calculada por Kamenetskii y la obtenida para distintos valores de δ en función del Ra . Hay que tener en cuenta que Ashmore calculaba el Rayleigh, Ra_c , en función de la temperatura adimensional de Frank-Kamenetskii en el centro del depósito, cumpliéndose la siguiente relación con el Rayleigh definido en este estudio:

$$Ra_c = Ra \cdot \theta_{0FK}$$

La línea azul de la figura 17, es la aproximación lineal realizada por Ashmore en base a sus resultados, mientras que los puntos representan los datos obtenidos mediante simulaciones del modelo aquí estudiado. Se observa que los resultados obtenidos siguen los patrones hallados experimentalmente. Como ya se ha comentado, al aumentar el número de Rayleigh con valores de δ constantes, la temperatura máxima obtenida decrecerá. A esto hay que sumar que, al producirse un desplazamiento vertical de la ubicación del punto de la esfera, las diferencias con el modelo de Frank-Kamenetskii, todavía se acentuarán más. Ashmore llegó a la misma conclusión que se ha alcanzado en este estudio, sobre que el valor de Rayleigh a partir del cual el efecto de la convección comienza a apreciarse, es un valor próximo a 600 en lugar del valor de 10000 propuesto por Frank-Kamenetskii. Es un efecto que se puede apreciar con bastante claridad observando los gráficos de la figura 17.

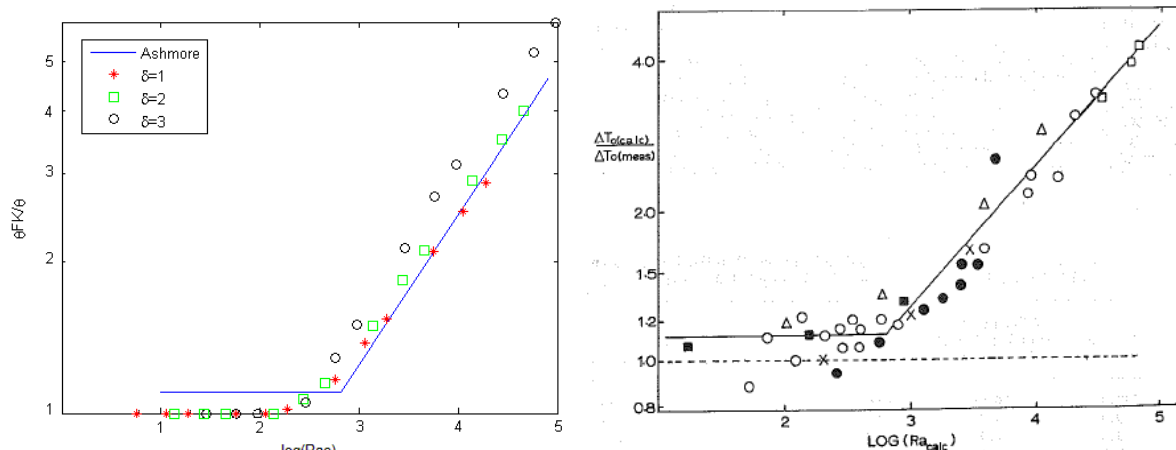


Fig. 4. Logarithmic plot of $\Delta T_{0(calc)}/\Delta T_{0(meas)}$ against Ra_{calc} . Δ Nitric oxide/oxygen, no inert gas, 1100 cm³ vessel, 70°C. \circ Nitric oxide/oxygen, with nitrogen, 1100 cm³ vessel, 70°C. \times Nitric oxide/oxygen, with hydrogen, 1100 cm³ vessel, 70°C. \square Nitric oxide/oxygen, with carbon dioxide, 1100 cm³ vessel, 70°C. \bullet Nitric oxide/oxygen, with nitrogen, 280 cm³ vessel, 70°C. \blacksquare Hydrogen/chlorine, with nitrogen, 660 cm³ vessel, 300°C. Dotted line gives expected value from conductive theory³, full line is drawn through experimental points.

Figura 17: Relación entre la temperatura adimensional calculada por Kamenetskii en el centro del depósito y la obtenida, tanto experimentalmente por Ashmore (derecha), como mediante simulaciones en este estudio (izquierda), en función del valor de Ra_c .

Más recientemente, Campbell, Cardoso y Hayhurst en “A comparison of measured temperatures with those calculated numerically and analytically for an exothermic chemical reaction inside a spherical batch reactor with natural convection”, realizaron un modelo matemático y, al igual que en este estudio, mediante simulación numérica, obtuvieron una serie de resultados que compararon con los obtenidos por Archer, el cual realizó un estudio sobre la descomposición del azometano

en un recipiente esférico en 1977. Las hipótesis que realizó Campbell en este estudio, fueron las mismas que las expuestas en el apartado 3. Se estudiaron adicionalmente el caso transitorio, realizando una serie de consideraciones respecto al consumo del reactante. Se obtuvieron diversos resultados, entre ellos el de la variación de la temperatura máxima con el Rayleigh, que será el que se discuta aquí.

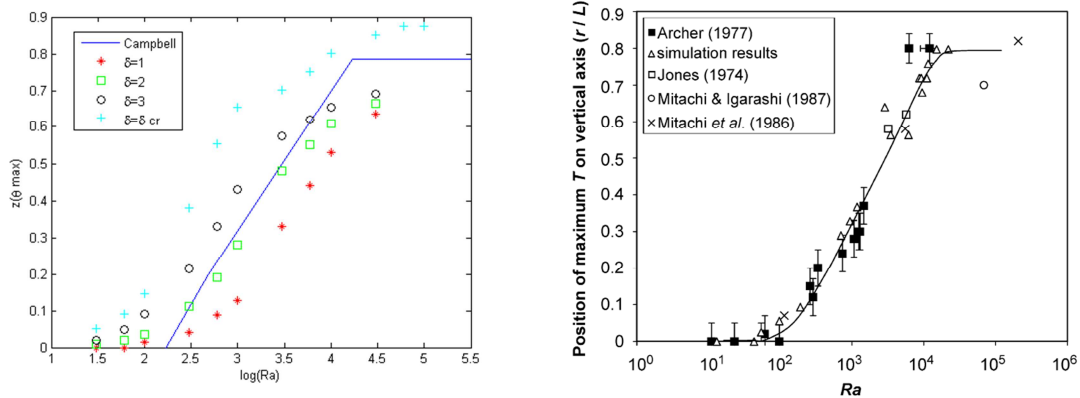


Figura 18: Variación de la altura a la que se ubica la temperatura máxima en el reactante en función del Rayleigh. Comparativa de los resultados obtenidos en este estudio (izquierda), con los obtenidos experimentalmente por Archer y analíticamente por Campbell (derecha). A la izquierda, la línea azul representa la aproximación realizada por Campbell a sus resultados y los puntos los valores obtenidos para distintos δ en este estudio. A la derecha, la línea representa igualmente la misma aproximación realizada por Campbell, y los puntos, resultados obtenidos experimentalmente en diversos estudios.

En la figura 18, se observa que, efectivamente, con la aparición del fenómeno de la convección natural, se produce un desplazamiento en sentido contrario al de la gravedad del punto de máxima temperatura. Se han obtenido resultados mediante la simulación del modelo aquí estudiado para distintos valores de δ , incluyendo el valor crítico de este parámetro para cada Rayleigh, con el fin de representar adicionalmente la altura máxima de la ubicación del punto a estudiar en cada situación. En este caso, la comparación entre ambos modelos, se realiza a nivel cualitativo, ya que no se pudo obtener la relación entre ambos Rayleigh por lo que existirá un desplazamiento de los puntos. Se observa que el modelo aquí planteado se aproxima razonablemente bien a los resultados experimentales y a los obtenidos por Campbell.

Finalmente se va a realizar una comparativa con los resultados obtenidos por Liu, Campbell, Cardoso y Hayhurst en “*Effects of natural convection on thermal explosion in a closed vessel*”. Liu estudió la variación del valor crítico para el cual se produce una explosión, representando dos regiones (una de soluciones estables y otra de explosiones), en función del valor del cociente de unos tiempos característicos que definió del siguiente modo:

$$\frac{\tau_H}{\tau_D} = \frac{1}{\delta} ; \quad \frac{\tau_H}{\tau_C} = \frac{1}{\delta} (RaPr)^{1/2}$$

Donde τ_D , es el tiempo característico de la conducción térmica. τ_C , el que tarda el fluido en desplazarse por convección una distancia igual a la característica del sistema y τ_H , el tiempo característico del calentamiento producido por la reacción.

Los resultados obtenidos quedan representados en la figura 19:

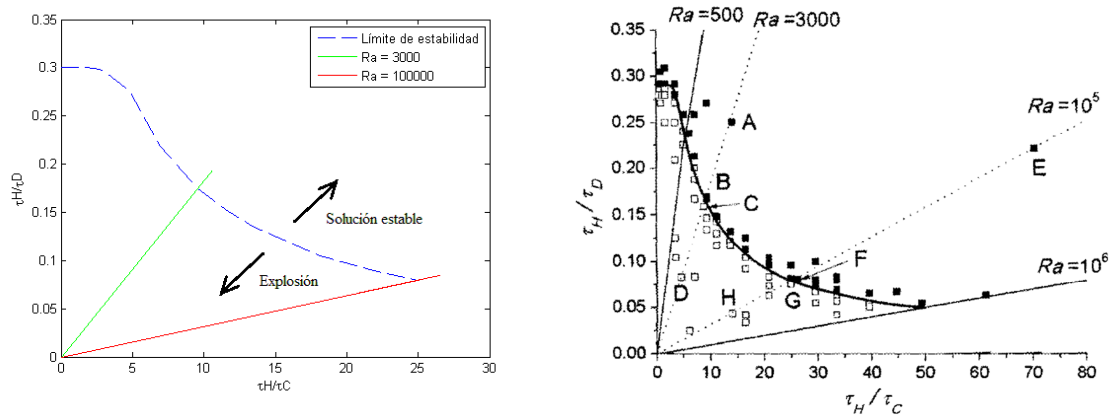


Figura 19: Regiones de estabilidad y de explosión separadas por una línea fronteriza en función del cociente de distintos tiempos característicos típicos del sistema. A la izquierda, la obtenida con los datos calculados por simulación del modelo aquí estudiado. A la izquierda la obtenida mediante simulación por Liu.

Ambas soluciones son prácticamente coincidentes. La forma de calcular en Rayleigh en ambos estudios es la misma, por lo que no es necesaria aproximación alguna. Nótese que, en el estudio aquí realizado, sólo se ha alcanzado a calcular soluciones para valores de Rayleigh no mayores de 10^5 . Liu demostró que su modelo se aproximaba bien a las soluciones observadas experimentalmente por Archer, lo queda debidamente representado en la figura 20, obtenida del propio estudio de Liu. Esto

implica que, en lo referente al cálculo del valor crítico del parámetro de Frank-Kamenetskii, el modelo aquí planteado también alcanza resultados aceptables.

A la vista de las comparaciones realizadas, se puede afirmar que, en principio, las aproximaciones realizadas en este modelo parecen sólidas, reflejando sin grandes márgenes de error el comportamiento de gases reactivos en depósitos esféricos en presencia de convección natural

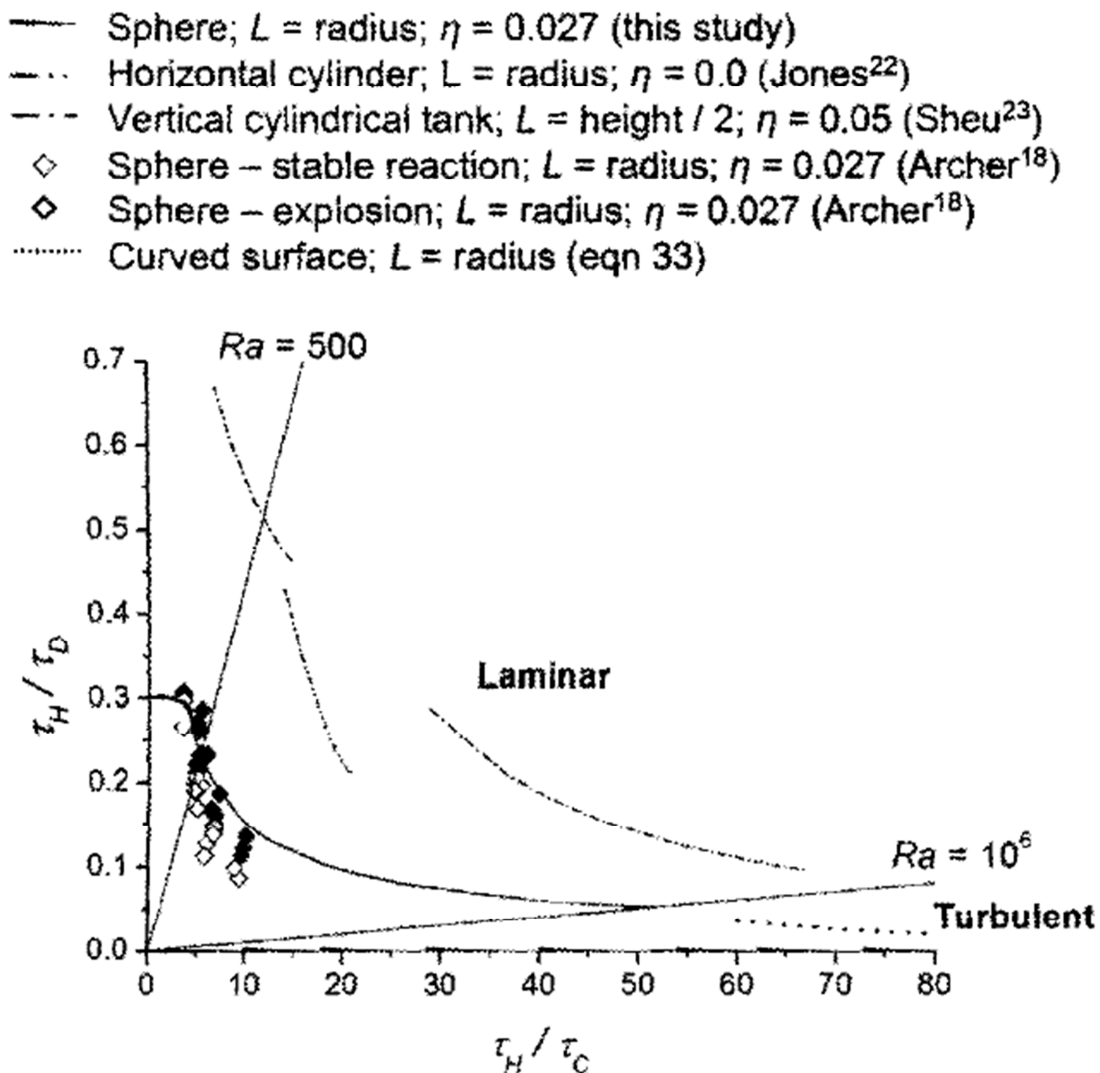


Figura 20: Comparación de los resultados calculados por Liu, con los observados experimentalmente por Archer.

Conclusiones:

El propósito de este proyecto, era estudiar la influencia de la convección natural en la ignición térmica de gases reactivos. Se ha podido comprobar que, para números de Rayleigh lo suficientemente grandes, la convección natural se produce, aumentando la tasa de calor cedido al ambiente respecto al caso del modelo puramente conductivo propuesto por Kamenetskii. La principal consecuencia es el aumento del valor crítico del parámetro de Frank-Kamenetskii, pudiendo alcanzarse soluciones estables para reacciones que, en un modelo puramente conductivo, desencadenarían una explosión.

Se ha estudiado la dependencia entre el valor del Rayleigh y la distribución de temperaturas del reactante, observándose un desplazamiento de la ubicación del punto de máxima temperatura, en sentido contrario al de la gravedad. Asimismo, se ha concluido que el aumento de la temperatura máxima alcanzada en el sistema dependía igualmente del Rayleigh, siendo esta menor al aumentar Ra manteniendo δ constante. No obstante, al aumentar el valor del Rayleigh, se alcanzarán mayores temperaturas si se aumenta lo suficientemente δ .

Finalmente, las comparativas realizadas con datos experimentales, muestran que el modelo planteado tiene una precisión lo suficientemente aceptable en el rango de valores de Rayleigh estudiado.

Anexo A: *Código de la “udf”*

Los términos fuente que se han de introducir en Fluent, son el término de fuerzas másicas de la ecuación de cantidad de movimiento y el término de generación de calor por reacción química de la ecuación de la energía. Ambos términos dependen de la temperatura adimensional, θ , del siguiente modo:

Término fuente de la ecuación de cantidad de movimiento: $Ra\theta$

Término fuente de la ecuación de la energía: $\delta \cdot e^{\theta}$

Debido a que Fluent, no permite de antemano introducir términos fuente que dependan de variables del sistema (sólo permite dar valores constantes a estos), se ha programado una “udf” o “User-Defined Function”, para definir los mismos. El código de esta “udf” es el siguiente:

```

/*****
/* Término fuente debido a las fuerzas másicas
*****/

#include "udf.h"

#define Ra 10000

DEFINE_SOURCE(xmom_source, c, t, dS, eqn)
{
    real source;

    source = Ra*(C_T(c, t));
    dS[eqn] = Ra;
    return source;
}

```

```
/* **** */
/* Término fuente debido al calor generado por la reacción
/* **** */

#include "udf.h"

#define delta 3

DEFINE_SOURCE(xenergy_source, c, t, dS, eqn)
{
    real source;

    source = delta*exp(C_T(c, t));
    dS[eqn] = delta*exp(C_T(c, t));
    return source;
}
```

Donde la variable $C_T(c,t)$ es la que aporta la temperatura de las distintas celdas en cada iteración.

Bibliografía y Referencias:

1. D. R. Jones en *"Int. J. Heat Mass Transfer"* Vol 17: *"Convective Effects in Enclosed, Exothermically Reacting Gases"*
2. M. J. Pilling: *"Low-temperature Combustion and Autoignition"*
3. J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble: *"Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation"*
4. Irvin Glassman, Richard A. Yetter: *"Combustion"*
5. Jonas A. Zukas, William P. Walters: *"Explosive Effects and Applications"*
6. B. J. Tyler: *"An Experimental Investigation of Conductive and Convective Heat Transfer during Exothermic Gas Phase Reactions"*
7. P. G. Ashmore, B. J. Tyler, T. A. B. Wesley en *"Explosions and Ignitions Kinetics"*: *"Experimental Investigations of Conductive and Convective Heat Transfer in Relation to Thermal Ignitions"*
8. A. N. Campbell, S. S. S. Cardoso, A. N. Hayhurst en *"Chemical Engineering Science"*, 62: *"A comparison of measured temperatures with those calculated numerically and analytically for an exothermic chemical reaction inside a spherical batch reactor with natural convection"*
9. Ting-Yueh Liu, Alasdair N. Campbell, Silvana S. S. Cardoso and Allan N. Hayhurst en *"Physical Chemistry Chemical Physics"* 2008, 10: *"Effects of natural convection on thermal explosion in a closed vessel"*
10. Ting-Yueh Liu, Alasdair N. Campbell, Allan N. Hayhurst, Silvana S.S. Cardoso en *"Combustion and Flame"*, 157: *"On the occurrence of thermal explosion in a reacting gas: The effects of natural convection and consumption of reactant"*
11. Ting-Yueh Liu, Silvana S.S. Cardoso en *"Combustion and Flame"*, 160: *"Effects of combined natural and forced convection on thermal explosion in a spherical reactor"*
12. *"ANSYS FUEENT Theory Guide"*: Release 14.0, November 2011
13. *"ANSYS FUEENT Tutorial Guide"*: Release 14.0, November 2011
14. *"ANSYS FUEENT UDF Manual"*: Release 14.0, November 2011
15. <http://www.cfd-online.com/>
16. <http://garfield.chem.elte.hu/Combustion/tutorial/main.html>